

DAS REFLEXIONSVERMÖGEN VON
GERMANIUM- UND SILIZIUM-EINKRISTALLEN
BEI ELASTISCHER DEFORMATION

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

vorgelegt von
ULRICH GERHARDT
aus Kassel
Februar 1965

DAS REFLEXIONSVERMÖGEN VON
GERMANIUM- UND SILIZIUM-EINKRISTALLEN
BEI ELASTISCHER DEFORMATION

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

vorgelegt von

ULRICH GERHARDT

aus Kassel

Februar 1965

Gedruckt mit Genehmigung
der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Frankfurt am Main

Dekan: Professor Dr. H. Lehmann

1. Berichterstatter: Professor Dr. W. Martienssen

2. Berichterstatter: Professor Dr. H. Bilz

Tag der mündlichen Prüfung: 25. Februar 1965

Inhaltsverzeichnis

	Seite
1 Einleitung	1
2 Meßmethode	4
3 Experimentelle Ergebnisse	7
4 Theorie der direkten optischen Übergänge im Kristall	13
5 Diskussion der experimentellen Ergebnisse	
51 Die Reflexionsmaxima des Germaniums bei 2 eV	17
511 Das Reflexionsvermögen bei elastischer Deformation .	18
512 Die energetische Lage der Reflexionsmaxima bei ela- stischer Deformation	27
52 Das Reflexionsmaximum des Siliziums bei 3,4 eV und die Maxima bei höheren Energien	34
6 Zusammenfassung	38
7 Anhang	
71 Die optische Isotropie des kubischen Kristalls	39
72 Der Einfluß der Winkeländerungen auf das Reflexions- vermögen des Germaniums bei 2 eV	41
8 Literaturverzeichnis	45



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41551901_0088

1 Einleitung

Das Reflexionsvermögen und die Absorptionskonstante von Halbleitern zeigen im sichtbaren und ultravioletten Spektralbereich eine

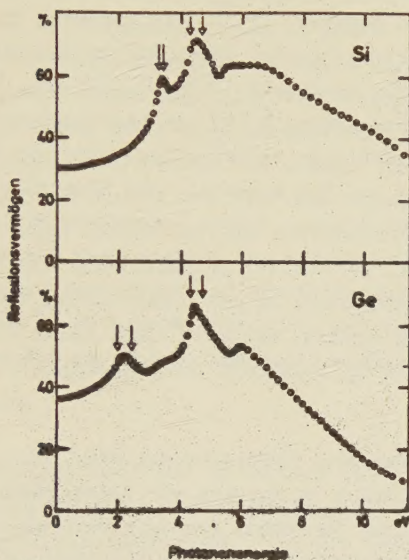


Fig. 1: Die Reflexionsspektren des Germaniums und des Siliziums bei 300° K nach Philipp und Taft ^{2),3)} Die Doppelpfeile bezeichnen die hier untersuchten Maxima und den Spektralbereich der Untersuchung.

kristallen gemessen werden; mit Hilfe der Kramers-Kronig-Beziehung lassen sich daraus die optischen Konstanten ermitteln, z.B. Real- und Imaginärteil der Dielektrizitätskonstante. Philipp und Taft haben als erste dieses Verfahren auf Germanium ²⁾ und Silizium ³⁾ angewandt. Die von diesen Autoren gemessenen Reflexionsspektren sind in Fig. 1 dargestellt.

Vergleicht man das Reflexionsspektrum $R(\hbar\omega)$ mit der Funktion

ausgeprägte Struktur. In diesem Bereich entsteht die Absorption durch direkte optische Übergänge zwischen dem Valenz- und Leitungsband. Bei diesen Übergängen gilt für den Wellenvektor $\hbar$ die Auswahlregel $\hbar$ (Anfangszustand) = $\hbar$ (Endzustand). Der kleinste vertikale Energieabstand ist deshalb die unterste energetische Grenze für diesen Absorptionsmechanismus. Bei größeren Energien übersteigt die Absorptionskonstante sehr schnell 10^5 cm^{-1} ; sie läßt sich nur in einem schmalen Energiebereich an Einkristallen messen ¹⁾, bei größeren Energien ist man auf Aufdampfschichten angewiesen. Das Reflexionsvermögen kann dagegen im gesamten Spektralbereich an Ein-

$\epsilon_2(\hbar\omega)$, dem Imaginärteil der Dielektrizitätskonstante, so zeigt sich im Bereich direkter Übergänge ein weitgehend analoges Verhalten, insbesondere liegen die Maxima beider Funktionen bei praktisch gleichen Energien. $\epsilon_2(\hbar\omega)$ ist bei direkten Übergängen durch die Übergangsmatrixelemente und die kombinierte Zustandsdichte zwischen Valenz- und Leitungsband gegeben ^{4), 5)}. Die Struktur in der kombinierten Zustandsdichte ist weitgehend durch die kritischen Punkte bestimmt, welche durch die Beziehung $\nabla_{\vec{k}} [E_s(\vec{k}) - E_v(\vec{k})] = 0$ definiert sind ^{6), 7)}; darin bezeichnen $E_s(\vec{k})$ das Leitungsband und $E_v(\vec{k})$ das Valenzband. Es gibt vier verschiedene Typen von kritischen Punkten. Die Topologie und die Symmetrie des Kristalls legen das Zahlenverhältnis der kritischen Punkte verschiedenen Typs zueinander fest. Das Reflexionsspektrum ist demnach über die kombinierte Zustandsdichte entscheidend durch die kritischen Punkte bestimmt. Außerdem ist die Lage der kritischen Punkte im $\vec{k}$ -Raum mit der Quantenzahl $\vec{k}$ der Zustände identisch, welche am Übergang beteiligt sind.

Bisher kennt man im wesentlichen drei indirekte Methoden, die Zuordnung bestimmter Reflexionsmaxima im Bereich der Eigenabsorption zu Übergängen zwischen bestimmten Zuständen festzulegen. Falls sich an einer Stelle des Reflexionsspektrums eine Spin-Bahnaufspaltung zeigt, kann man deren Wert mit dem entsprechenden Wert des freien Atoms und den berechneten Werten im Kristall ⁸⁾ vergleichen und so zu einer Aussage über einen Zustand kommen. Man kann weiter die gemessene Verschiebung der Reflexionsmaxima unter hydrostatischem Druck ⁹⁾ und beim Legieren verschiedener Substanzen mit gleicher Kristallstruktur (z.B. Ge und Si ¹⁰⁾) mit entsprechenden Rechnungen ¹¹⁾ vergleichen; da Zustände mit unterschiedlichen Quantenzahlen zum Teil erheblich verschiedene Druckkoeffizienten haben, andererseits der Druckkoeffizient für einen Zustand mit gegebenen Quantenzahlen bei gleicher oder nahe verwandter Kristallstruktur nur wenig von der Atomart abhängt, ist hierdurch ebenfalls eine Zuordnung möglich. Schließlich kann man die Funktion $\epsilon_2(\hbar\omega)$ aus den berechneten Energiebändern dadurch bestimmen, daß man dem Bänderschema die kombinierte Zustandsdichte entnimmt und die Impulsmatrixelemente mit den gleichen Wellenfunktionen berechnet,

die zur Berechnung der Energiebänder benutzt wurden ^{4), 5), 12)}. Der Vergleich mit der gemessenen Funktion $E_i(k\omega)$ legt dann die gewünschte Zuordnung fest.

Die drei genannten Methoden haben sehr wesentlich zum Verständnis des Reflexionsspektrums im Gebiet der Eigenabsorption beigetragen, grundsätzlich sollte mit Hilfe der dritten Methode sogar eine eindeutige Zuordnung aller Reflexionsmaxima möglich sein. Leider sind aber auch die besten Berechnungen der Energiebänder noch fehlerhaft, Energieunterschiede von einigen Zehntel eV zwischen der experimentell bestimmten und der theoretisch berechneten Lage von kritischen Punkten treten auf. Da die kombinierte Zustandsdichte schon durch kleine Änderungen im Verlauf der Energiebänder beträchtlich geändert werden kann, ist es wünschenswert, die bestehenden Zuordnungen mit Hilfe einer direkten Methode zu prüfen. Gerade das wird durch die Diskussion der Messungen an uniaxial verformten Kristallen möglich.

Philipp, Dash und Ehrenreich haben 1962 als erste das Reflexionsvermögen von uniaxial elastisch verformten Germanium- und Siliziumkristallen untersucht ¹³⁾. Die Verformung bewirkt beim Germanium eine Verschiebung in der energetischen Lage des Maximums nahe 2,1 eV. Eine Änderung des maximalen Reflexionsvermögens haben die Autoren nicht nachweisen können. Auf die übrigen in Fig. 1 bezeichneten Maxima hatte die Verformung keinen Einfluß.

In dieser Arbeit wird die gleiche experimentelle Methode von Philipp, Dash und Ehrenreich benutzt. Die höhere Meßgenauigkeit und die Verwendung von polarisiertem Licht ermöglichen es, neue Meßergebnisse anzugeben. Mit ihrer Hilfe können die schon bekannten Zuordnungen der optischen Übergänge zu kritischen Punkten mit bestimmter Symmetrie geprüft und neue Zuordnungen angegeben werden. Aus den Messungen am Germanium können außerdem Aussagen über die Änderung der Matrixelemente gewonnen werden. Die Diskussion ergibt einen Satzesatz für die Änderungen der Matrixelemente bei elastischer Deformation. Aus der Energieverschiebung der Reflexionsmaxima werden einige Konstanten des Deformationspotentials bestimmt.

2 Meßmethode

Eine einfache Methode, Kristalle elastisch zu verformen, ist das Biegen dünner Kristallplättchen: Wirken auf die Enden des Kristallplättchens K , wie in Fig. 2 skizziert, Drehmomente von gleichen Betrag ein, so wird das Plättchen kreisförmig gebogen. Die Verformungen an der konkaven und der konvexen Seite haben gleichen Betrag, aber verschiedenen Vorzeichen. Mißt man das Reflexionsvermögen am gebogenen Kristall, so verhalten sich die konvexe und die konkave Seite des Plättchens wie die Oberflächen eines uniaxial gedehnten bzw. gestauchten Kristalls mit homogener Verformung.

Die Dehnung an der Oberfläche in Richtung der Längskante des Plättchens, ϵ_1 , ist nach $\epsilon_1 = \frac{d}{2R}$ durch die Plättchendicke d und den Krümmungsradius R gegeben. d wird mit einer Meßuhr direkt bestimmt, R aus der Brennweite des durch den Kristall gebildeten Zylinderhohlspiegels ermittelt. ϵ_1 läßt sich so mit einer Genauigkeit von $\Delta\epsilon_1/\epsilon_1 = \pm 5\%$ angeben.

Die Ausgangsmaterialien zur Herstellung der Plättchen sind Germanium- und Silizium-Einkristalle mit einem spezifischen Widerstand von rund 20 Ωcm bzw. 1 Ωcm . Diese werden mit einer Diamantsäge in Plättchen von etwa 10 mm Länge, 5 mm Breite und 0,6 mm Dicke zerschnitten und mit Karborundpulver der Körnung 1000 auf 0,4 mm Dicke abgeschliffen. Nach Spülen der Plättchen in destilliertem Wasser und anschließend in Methanol werden sie in eine Mischung von HNO_3 (1,52 g/cm³), HF (40 %) und Eisessig (Mischungsverhältnis 2 : 1 : 1 Volumenteile) gebracht¹⁴⁾ und bei 20 °C auf etwa 0,2 mm abgeätzt. Der Ätzwergang wird öfters durch Verdünnen mit Methanol abgestoppt und danach mit frischer Ätzlösung fortgesetzt. Zum Schluß wird mehrere Male in Methanol gespült, dann der Kristall schnell aus dem Methanolbad in einen Strom warmer Luft gebracht und das den Kristall benetzende Methanol weggeblasen. Alle beim Ätzwergang verwendeten Chemikalien sind vom Reinheitsgrad "pro analysi". Nach Messung der Dicke wird der Kristall in die Klemmen der Biegevorrichtung (Fig. 2) eingespannt. Indiumfolien zwischen den Kristallenden und den Klemmen schützen die Kristalloberfläche vor Kratzern, die schon bei

kleinen Verformungen zum Zerspringen des Kristalls führen wurden. Auf diese Weise lassen sich Verformungen bis zu $\epsilon_3 = 1\%$ erreichen.

Für die Messungen werden Kristallplättchen benötigt, deren Längsrichtungen bestimmte Orientierungen zu den Kristallachsen haben. Die Ausrichtung der Plättchen erfolgt an Hand der Wachstumsmarken der Einkristalle, die in charakteristischer Symmetrie je nach Wachstumsrichtung des Kristalls auftreten. Die Kontrolle dieser Methode mit Hilfe der Leuchtfiguren, welche die Oberflächen von strukturgebten Plättchen zeigen ¹⁴⁾, ergibt einen maximalen Fehler von 12° .

Fig. 2 zeigt die optische Anordnung zur Messung des Reflexionsvermögens. Zur spektralen Zerlegung des Lichtes dient der Prismenmono-

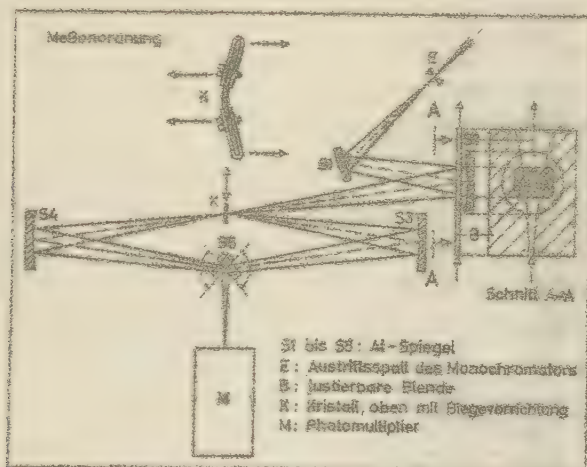


Fig. 2: Der Strahlengang zur Messung des Reflexionsvermögens.

chromator SPM 1 der optischen Werke Jena mit Wechselprismen (Flintglas und NaCl). Als Strahlungsquelle wird je nach Spektralbereich eine Glühlampe oder eine Deuteriumlampe benutzt, die beide aus elektronisch stabilisierten Netzgeräten gespeist werden. Der Spiegel S 2 bildet über S 1 den Austrittsspalt E des Monochromators auf den Kristall K ab, der Spiegel S 3 wiederum bildet die Kristall-

oberfläche über den Klappspiegel S 5 auf die Kathode des Multipliers M ab. Zur Messung der Vergleichsintensität wird der Kristall aus dem Strahlengang geschoben; der Spiegel S 4 bildet dann über den herumgeklappten Spiegel S 5 das Spaltbild auf die gleiche Stelle der Kathode ab. Die Spiegel S 3 und S 4 haben gleiche Brennweite und sind gleichzeitig im Hochvakuum mit Aluminium bedampft worden. Setzt man ihre optischen Eigenschaften als gleich voraus, so liefert das Verhältnis der Multiplierströme für den am Kristall reflektierten Strahl und den Vergleichsstrahl das Reflexionsvermögen des Kristalls. Durch Austauschen der Spiegel S 3 und S 4 zeigt sich, daß der Fehler im Absolutwert des Reflexionsvermögens, der durch die etwas unterschiedlichen optischen Eigenschaften der Spiegel zustande kommt, von der Größe $\Delta R/R \approx \pm 1\%$ ist.

Die Abweichung von der senkrechten Incidenz wird kleiner als 8° gehalten, um das gemessene Reflexionsvermögen mit dem bei senkrechter Incidenz näherungsweise gleichsetzen zu können. Zur Erzeugung des linear polarisierten Lichtes dient ein Glan-Thompson-Prisma, es ist vor dem Eintrittsspalt des Monochromators aufgestellt. Das Intensitätsverhältnis für lineare Polarisation der Lichtbündel vor der Kathode des Photomultipliers in x- und y-Richtung beträgt etwa 10^{-3} .

Der Photomultiplier (EMI 6256 B, S 13 Kathode oder EMI 9558 BQ, S 20 Kathode) bezieht seine Beschleunigungsspannung aus einem elektronisch geregelten, spannungsstabilisierten Netzgerät. Sein Ausgangssignal wird über einen Galvanometerverstärker einem Kompensationschreiber zugeführt. Je ein Synchronmotor treibt den Papiervorschub des Schreibers und die Wellenlängentrommel des Monochromators. Ein dritter Synchronmotor bewegt die justierbare Blende B (Fig. 2) in der eingezeichneten Richtung. Registrierpapier, Wellenlängentrommel und Blende werden zunächst in genau festgelegte Anfangsstellungen gebracht, dann alle drei Motore gleichzeitig eingeschaltet. Beim Registrieren des Ausgangssignals decken die Blendenbacken je nach Stand der Wellenlängentrommel einen kleineren oder größeren Teil des vom Monochromator kommenden Lichtbündels ab. Die Krümmenform der Blendenbacken ist so einjustiert, daß der Ausschlag für den Vergleichsstrahlengang (Abbildung ohne Kristall über S 4)

im registrierten Wellenlängenbereich auf $\pm 1 \%$ konstant ist. Die Blende gleicht also die Wellenlängenabhängigkeit der Lampenintensität, der Durchlaßkurve der optischen Anordnung und der Empfindlichkeit des Photomultipliers im registrierten Spektralbereich aus. Diese Methode macht es möglich, den Nullpunkt des Schreibers mit Hilfe einer Kompensationsspannung um die zehnfache Schreibbreite zu verschieben. Eine Änderung von 1% im Ausgangssignal bewirkt dann einen Schreiberausschlag von $2,5 \text{ cm}$.

Zum Registrieren des Ausschlags, der von dem am Kristall reflektierten Licht herrührt, wird die Beschleunigungsspannung des Photomultipliers so lange erhöht, bis der Ausschlag bei gleicher Kompensationsspannung wieder in den Schreibbereich des Monochromators kommt. Erneutes Registrieren liefert eine zweite Kurve. Die Differenz beider Kurven ist in guter Näherung dem Reflexionsvermögen des Kristalls proportional. Diese Näherung liefert das gemessene Reflexionsvermögen mit einem relativen Fehler von $\Delta R/R \leq 10^{-4}$, falls der Ausschlag der Vergleichsintensität auf $\pm 1 \%$ konstant ist. Mit dieser Methode läßt sich die Kurvenform des Reflexionsvermögens eines Kristalls innerhalb des relativen Fehlers $\pm 5 \times 10^{-4}$ reproduzieren (ohne Polarisator $\pm 3 \times 10^{-4}$). Zur Messung des Absolutwertes des Reflexionsvermögens wird ohne Kompensationsspannung bei einer Wellenlänge das Verhältnis der durch Meß- und Vergleichsstrahl hervorgerufenen Ausschläge gebildet. Der absolute Fehler des so gemessenen Reflexionsvermögens ist $\Delta R_q = \pm 2 \%$. Bei verschiedenen Belastungen und Polarisationsrichtungen läßt sich die relative Lage der Kurven eines Kristalls zueinander auf $\Delta R_r = \pm 0,5 \%$ angeben.

3 Experimentelle Ergebnisse

Die Fig. 3 bis 11 zeigen die Meßkurven für zwei Reflexionsmaxima des Germaniums und zwei des Siliziums. Die Maxima sind in Fig. 1 durch Doppelpfeile gekennzeichnet; der Abstand der beiden Pfeile gibt den jeweils untersuchten Spektralbereich an. Zu allen Kurven ist die Orientierung der Spannungsachse und die Dehnung bezüglich

dieser Achse aufgeführt, außerdem die Reproduzierbarkeit der Meßpunkte einer Kurve und das spektrale Auflösungsvermögen, welches die gemessene Halbwertsbreite einer Spektrallinie in diesem Bereich ist.

Alle Kurven sind innerhalb einiger Stunden nach dem Ätzworgang an Luft bei Zimmertemperatur aufgenommen worden. In dieser Zeit ändert sich das Reflexionsvermögen nur wenig, die Änderung liegt innerhalb der Meßgenauigkeit. Nach einigen Tagen läßt sich dagegen ein deutliches Absinken des Reflexionsvermögens feststellen, gleichzeitig verschieben sich die Maxima zu kleineren Photonenenergien. Diese Änderungen kommen durch die wachsende Oberflächenbelegung der Kristalle zustande, sie werden umgekehrt zur Bestimmung der Güte frisch geätzter Oberflächen benutzt: Nur Kristallplättchen, deren maximale Reflexion im optimalen Bereich liegt, werden zur Messung zugelassen.

Im Rahmen der Meßgenauigkeit läßt sich beim 3,4 eV-Maximum des Siliziums kein Unterschied im Reflexionsvermögen von Kristallen mit $10^4 \Omega \text{cm}$ und $1 \Omega \text{cm}$ finden. Andere Untersuchungen ^{15), 16)} haben ergeben, daß auch starke Dotierungen das Reflexionsvermögen nur wenig ändern. Es wird deshalb angenommen, daß die aufgeführten Messungen nicht durch die Dotierung des Ausgangsmaterials beeinflusst sind. Auch der Fehler in der Orientierung der Spannungsachse zu den Kristallachsen und zum Polarisationsvektor hat keine merklichen Auswirkungen auf die Meßkurven: Kristalle, deren Kanten mit Hilfe der Strukturätzung auf $\pm 0,5^\circ$ zu den Kristallachsen ausgerichtet worden sind und bei denen die Ausrichtung der Kanten zum Polarisationsvektor fehlerhaft von gleicher Größenordnung ist, lassen keinen Unterschied zu Kristallachsen mit einem Orientierungsfehler von $\pm 2^\circ$ erkennen.

In Fig. 3 und 4 ist das Reflexionsvermögen von Germaniumkristallen bei 2 eV aufgetragen. Zunächst ist die Struktur in der Reflexion des ungestörten Kristalls bemerkenswert, sie ist in Fig. 1 nicht aufgelöst. Diese Struktur ist zuerst von Tauc und Antončič ¹⁷⁾ angedeutet worden. Die elastische Deformation bewirkt eine energetische Verschiebung der beiden Reflexionsmaxima bei 2,1 eV und 2,3 eV.

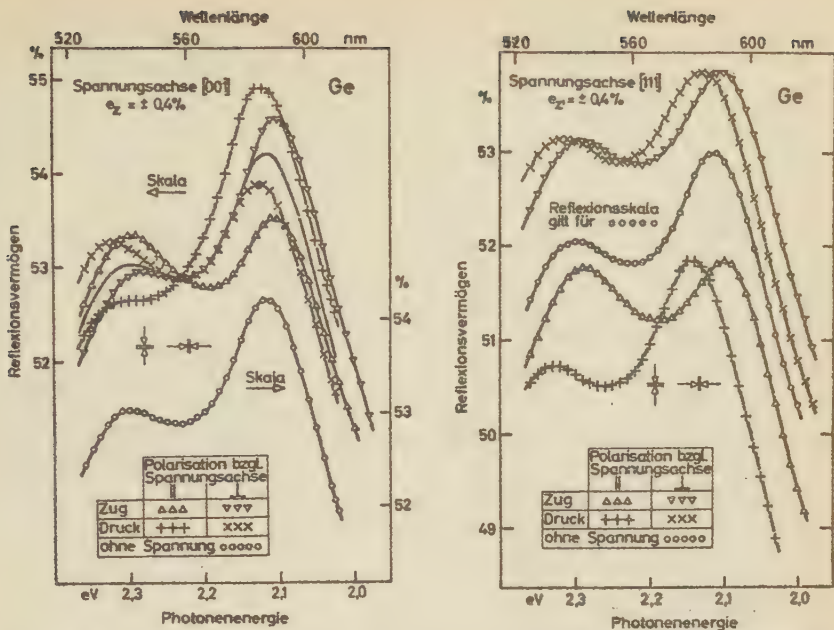


Fig. 3 und 4: Das Reflexionsvermögen von unverformten und uniaxial in $[00]$ - und $[111]$ -Richtung elastisch verformten Germaniumkristallen bei 300 °K an Luft nahe 2 eV. Die Kurven geben das mit linear polarisiertem Licht gemessene Reflexionsvermögen für parallele und senkrechte Polarisation zur Spannungsachse und für die Dehnungen $\pm 0,4\%$ in Richtung der Spannungsachse an. Die Pfeile bezeichnen die Reproduzierbarkeit der Meßpunkte einer Kurve und das spektrale Auflösungsvermögen. In Fig. 3 ist die untere Kurve (unverformter Kristall) ohne Meßpunkte im oberen Teil nochmals angegeben.

Beide Maxima werden unabhängig von der Orientierung der Spannungsachse zu den Kristallachsen und zum Polarisationsvektor bei Zugspannung ($\epsilon_z > 0$, $\epsilon_z' > 0$) immer zu kleineren Energien, bei Druckspannung immer zu größeren Energien verschoben. Diese Energiewerschiebung ist von der Größenordnung 10^{-2} eV. Außerdem ändert sich das Reflexionsvermögen der elastisch verformten Kristalle. Dieser Effekt hängt nach Größe und Richtung vom betrachteten Maximum und von der Orientierung der Spannungsachse zu den Kristallachsen und zum Polarisationsvektor ab. Die maximale Änderung der Differenz des Reflexionsvermögens beider Maxima beträgt etwa 1 %. Diese Differenz läßt sich wegen der hohen Reproduzierbarkeit auf 0,03 % genau bestimmen. Aus Gründen, die in der Diskussion dieser Meßergebnisse

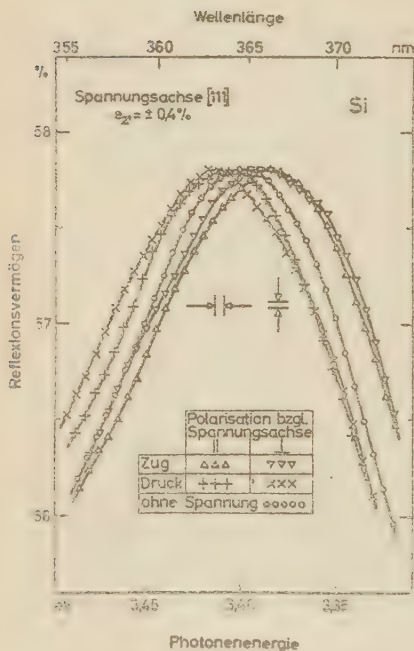
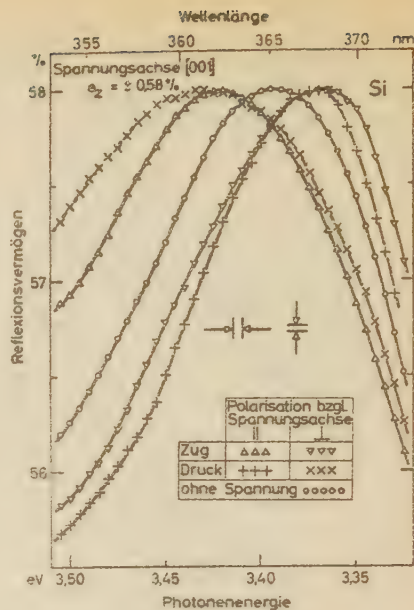
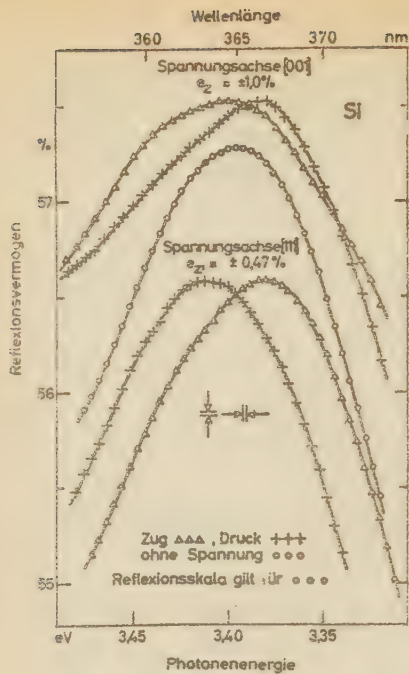


Fig. 5, 6 und 7: Das Reflexionsvermögen von Silizium bei 3,4 eV. Fig. 5 zeigt die Messungen mit unpolarisiertem Licht bei den Spannungsachsen $[00\bar{1}]$ und $[\bar{1}11]$, Fig. 6 und 7 enthalten die entsprechenden Messungen mit polarisiertem Licht.

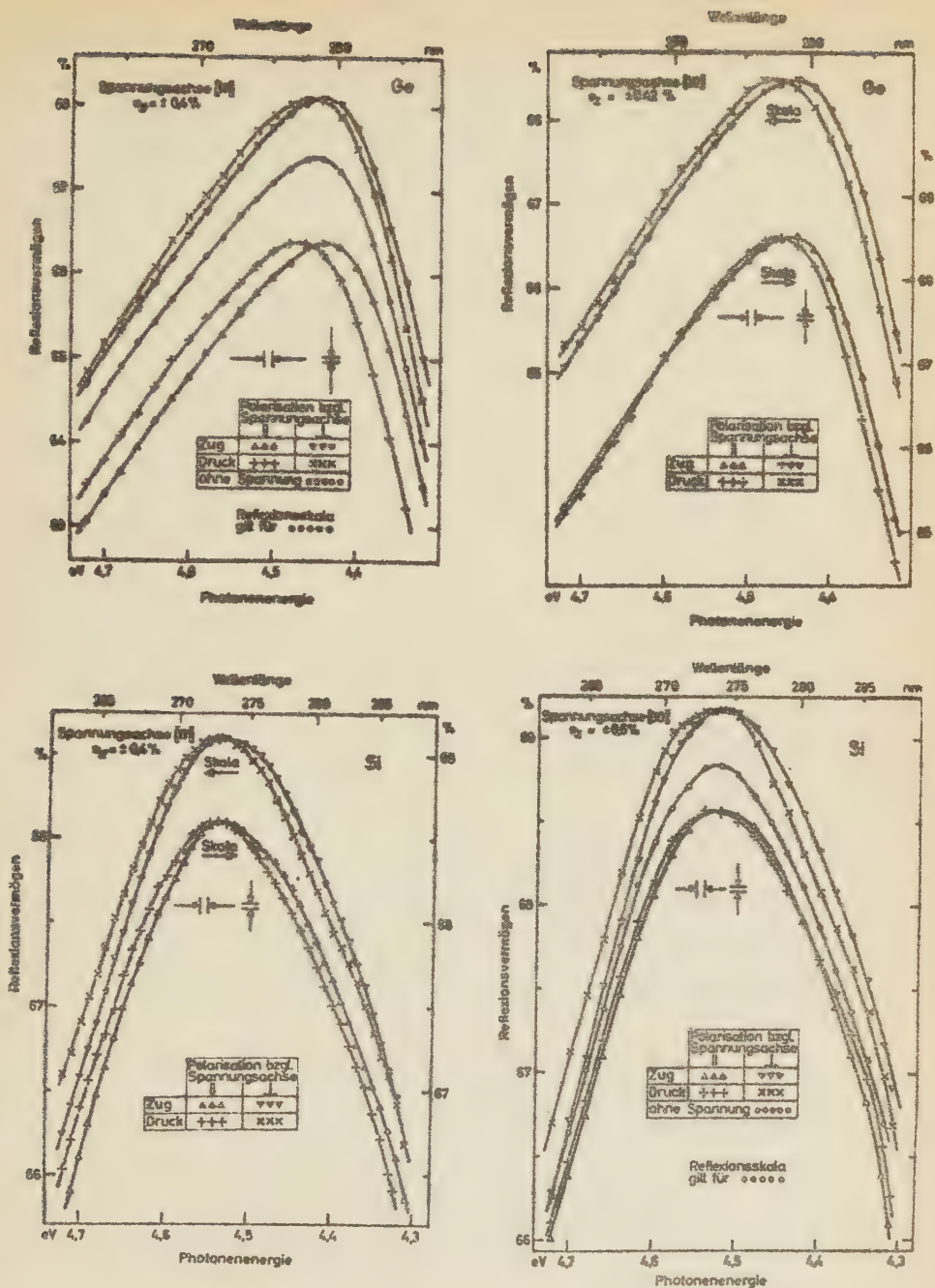


Fig. 3 bis 11: Das Reflexionsvermögen von Germanium (oben) und Silizium (unten), gemessen mit polarisiertem Licht für die Spannungsachsen [111] und [001].

deutlich werden, sind die Kurven der Fig. 3 in Richtung der Reflexionsachse parallel so verschoben, daß sie sich alle bei 2,23 eV schneiden. Die dazu nötigen Verschiebungen gegenüber der gemessenen relativen Lage der Kurven zueinander ist $\Delta R = \pm 0,2 \%$, sie liegen damit innerhalb des Maßfehlers $\Delta R_{\pm} = \pm 0,5 \%$, mit der die Lage der Kurven zueinander bestimmt werden kann.

Die Fig. 5 bis 7 geben das Verhalten der Reflexion des Siliziums im Bereich des Maximums bei 3,4 eV bei verschiedenen Spannungsachsen und Polarisationsrichtungen an. Fig. 5 enthält zunächst die Messungen für zwei Spannungsachsen mit unpolarisiertem Licht, sie sind bereits in einer vorläufigen Mitteilung angegeben worden¹⁸⁾. Während die Kurven zur Spannungsachse $[111]$ wieder eine Energieverschiebung in gleicher Richtung wie die Kurven des Germaniums bei 2 eV zeigen, sind die Kurven zur Spannungsachse $[001]$ gegenüber der Reflexionskurve des ungestörten Kristalls stark verbreitert. Diese Verbreiterung löst sich bei der Verwendung von polarisiertem Licht in Verschiebungen des Reflexionsmaximums auf, wie in Fig. 6 zu sehen ist. Für Zugspannung ist die Richtung der Energieverschiebung zu kleineren Energien bei senkrechter Polarisation, dagegen zu größeren Energien bei paralleler Polarisation, entsprechend umgekehrte Verhältnisse findet man für Druckspannung. Von den bei etwa gleicher Energie liegenden Reflexionsmaxima ist außerdem das mit senkrechter Polarisation immer gegenüber dem mit paralleler Polarisation verbreitert. Die Fig. 7 enthält die Messungen mit polarisiertem Licht für die Spannungsachse $[111]$. Auch hier zeigt sich eine Verbreiterung der Kurven bei senkrechter Polarisation gegenüber denen bei paralleler Polarisation. Die Energieverschiebung ist die gleiche wie bei der Messung mit unpolarisiertem Licht, Fig. 5.

Die Fig. 8 bis 11 zeigen schließlich die Messungen an den beiden Maxima des Germaniums und des Siliziums bei 4,5 eV. Die Energieverschiebung ist in allen Fällen zu kleineren Energien bei Zugspannung, zu größeren bei Druckspannung. Die Polarisationseffekte sind weniger ausgeprägt als in den Fig. 3, 4 und 6, 7.

4 Theorie der direkten optischen Übergänge im Kristall

Zunächst werden zwei nicht entartete Energiezustände des Elektrons im Kristall, $E_r(\vec{k})$ und $E_s(\vec{k})$, im Valenz- und Leitungsband betrachtet. Der Imaginärteil der Dielektrizitätskonstante ist dann durch die Gl.

$$(1) \quad \varepsilon_2(\omega) = \frac{\pi e^2}{2 \varepsilon_0 \omega} \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{B.Z.}} d^3\vec{k} \frac{2 \cos^2 \vartheta |\vec{P}_{rs}(\vec{k})|^2}{m^2 \hbar \omega_{s,r}} \delta(\omega - \omega_{s,r}(\vec{k})); \quad \hbar \omega_{s,r} = E_s - E_r \quad (*)$$

gegeben ¹⁹⁾. Hier ist

$$(2) \quad \vec{P}_{rs} = - \left(\psi_r, i \hbar \nabla \psi_s \right)$$

das Impulsmatrixelement und ϑ der Winkel zwischen $\vec{P}_{rs}$ und dem Polarisationsvektor des Lichtes. Die Gleichung (1) gilt unter folgenden Voraussetzungen:

1. Der Wellenvektor des betrachteten Elektrons ist groß gegen den Wellenvektor des Photons, welches den Übergang hervorruft (Dipolnäherung).
2. Effekte wie Elektron-Phonon-Wechselwirkung, Streuung an Störstellen usw. sind vernachlässigt.
3. Alle Zustände des Valenzbandes $E_r(\vec{k})$ sind besetzt, alle Zustände des Leitungsbandes $E_s(\vec{k})$ unbesetzt.

Die Größe $|\vec{P}_{rs}|^2$ hängt in vielen Fällen, insbesondere bei Silizium und Germanium, nur schwach von $\vec{k}$ ab ¹²⁾. In solchen Fällen kann die Gl. (1) auch in der Form

$$(3) \quad \varepsilon_2(\omega) = \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 m^2 \hbar} \cdot \frac{J_{rs}(\omega)}{\omega^2} \cos^2 \vartheta |\vec{P}_{rs}|^2 = C(\omega) \cos^2 \vartheta |\vec{P}_{rs}|^2$$

*) Die Gleichung ist gegenüber ¹⁹⁾ im praktischen Maßsystem geschrieben.

geschrieben werden, wenn

$$(1) \quad J_{\pm}(\omega) = \int_{\vec{R}, \vec{Z}} d^3\vec{k} \frac{1}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_{\pm}(\vec{k})) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{ds}{|\nabla_{\vec{k}} \omega_{\pm}(\vec{k})|} \quad \omega_{\pm}(\vec{k}) = \omega \quad *)$$

die kombinierte Zustandsdichte zwischen den Bändern $E_{+}(\vec{k})$ und $E_{-}(\vec{k})$ ist.

In allen Fällen von praktischem Interesse sind die Bänder $E_{+}(\vec{k})$, $E_{-}(\vec{k})$ entartet. Nach Heitler²⁰⁾ ist dann in $|\vec{P}_{\pm}|^2$ über alle Anfangs- und Endzustände zu summieren und über die Anfangszustände zu mitteln. Wenn $E_{+}(\vec{k})$ d_{+} -fach, $E_{-}(\vec{k})$ d_{-} -fach entartet ist, hat man also folgenden Übergang zu vollziehen:

$$(2) \quad |\vec{P}_{\pm}|^2 \rightarrow \frac{1}{d_{\pm}} \sum_{g=1}^{d_{+}} \sum_{\vec{k}=1}^{d_{-}} |\vec{P}_{\pm}|^2$$

Ist $\vartheta_{\vec{P}_{\pm}}$ der Winkel zwischen $\vec{P}_{\pm}$ und dem Polarisationsvektor, so ergibt sich für $E_{\pm}$

$$(3) \quad E_{\pm}(\omega) = C(\omega) \frac{1}{d_{\pm}} \sum_{g, \vec{k}} \cos^2 \vartheta_{\vec{P}_{\pm}} |\vec{P}_{\pm}|^2$$

Die Entartung der Eigenwerte E_{+} und E_{-} soll jetzt genauer untersucht werden. Ist der Hamiltonoperator des betrachteten Problems invariant gegenüber den Elementen einer Symmetriegruppe, so bilden die Eigenfunktionen eines Energieeigenwertes die Basis einer irreduziblen Darstellung dieser Gruppe; der Entartungsgrad ist somit gleich der Dimension dieser Darstellung. Die Energien eines Elektrons im Kristall sind die Eigenwerte eines Hamiltonoperators. Dieser ist invariant unter den Elementen der Raumgruppe des Kristalls.

*) Gegenüber²²⁾ um den Faktor $1/2$ abweichende Definition, weil Spinvariablen später mitberücksichtigt werden sollen.

Für $\vec{k}$ -Vektoren, die im Inneren der Brillouinzone enden, lassen sich die irreduziblen Darstellungen der Raumgruppe nach einem allgemeinen Verfahren aus den irreduziblen Darstellungen der Gruppe des betrachteten $\vec{k}$ -Vektors ableiten ^{21), 22)}. Die Blochfunktionen

$$(7) \quad \Psi_{\vec{k}, l}^{(\mu)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}, l}^{(\mu)}(\vec{r}) ; \quad l = 1 \dots d_{\mu}$$

sollen Basisfunktionen zur μ -ten irreduziblen Darstellung der Gruppe K des $\vec{k}$ -Vektors sein. d_{μ} ist die Dimension der Darstellung. Die Funktionen

$$(8) \quad \Psi_{\vec{k}^m, l}^{(\mu)} ; \quad l = 1 \dots d_{\mu} , \quad m = 1 \dots q$$

sind dann Basisfunktionen zu einer irreduziblen Darstellung der Raumgruppe, wenn q die Zahl der verschiedenen $\vec{k}^m$ -Vektoren bezeichnet, die aus $\vec{k}$ durch die Elemente $\{\alpha | a\}$ der Punktgruppe entstehen. Diese irreduzible Darstellung der Raumgruppe wird durch k^*, μ bezeichnet. G_0 wird durch die geraden und ungeraden Drehungen der Elemente $\{\alpha | a\}$ aus der Raumgruppe G gebildet. q ist also die Zahl der Arme des Sterns von $\vec{k}$. Der zu dieser irreduziblen Darstellung der Raumgruppe gehörende Energieeigenwert ist demnach durch den Vektor $\vec{k}$ und den Index μ der Darstellung zu kennzeichnen, er ist $d_{\mu} \cdot q$ -fach entartet. Hierdurch ist die Entartung der Bänder r und s bestimmt, wie sie in Gl. (6) benötigt wird. Sie ist nicht allein durch die Entartung d_{μ} eines Eigenwertes bei festem $\vec{k}$ gegeben, sondern noch mit der Zahl der Arme des $\vec{k}$ -Sterns zu multiplizieren.

Um die Gleichung für E_z weiter behandeln zu können, ist es nötig, die Auswahlregeln für optische Übergänge zwischen den Bändern $E_r(\vec{k})$ und $E_s(\vec{k})$ zu kennen. Dazu wird die genaue Form der Impulsmatrixelemente betrachtet:

$$(9) \quad P_{rs} = \left(\psi_{\vec{k}_1, i}^{(\vec{k}^*, 2)}, v_j^{(\mu)} \psi_{\vec{k}_2, l}^{(\vec{k}^*, \nu)} \right)$$

$\psi_j^{(\mu)}$ bezeichnet die Basisfunktion einer Vektordarstellung, die dem Impulsoperator zuzuordnen ist. Das Matrixelement ist nur dann von Null verschieden, wenn das Produkt $v_j^{(\mu)} \psi_{\vec{k}_2, l}^{(\vec{k}^*, \nu)}$ eine Funktion enthält, die zur gleichen Zeile der gleichen irreduziblen Darstellung gehört wie die Funktion $\psi_{\vec{k}_1, i}^{(\vec{k}^*, 2)}$. Daraus folgt sofort als notwendige Bedingung die Auswahlregel für den $\vec{k}$ -Vektor

$$(10) \quad \vec{k}_1 = \vec{k}_2 = \vec{k}$$

Dies ist die wohlbekannte Bedingung für direkte Übergänge. Wegen der Form der Blochfunktionen wird das Matrixelement unter Berücksichtigung dieser Auswahlregel

$$(11) \quad P_{rs} = P(\vec{k})_{i,l}^{2,1} = \left(u_{\vec{k}, i}^{(2)}, v_{m,j}^{(\mu)} u_{\vec{k}, l}^{(\nu)} \right)$$

Die Blochfunktionen (7) sind Basisfunktionen zu den irreduziblen Darstellungen von $\mathcal{K}$; beschränkt man sich wieder auf $\vec{k}$ -Vektoren im Inneren der Brillouinzone, so folgt daraus, daß $u_{\vec{k}, i}^{(\omega)}$ Basisfunktionen zu den irreduziblen Darstellungen der Punktgruppe $G_0(\vec{k})$ sind. $G_0(\vec{k})$ enthält als Elemente alle geraden und ungeraden Drehungen $\{\rho | 0\}$, die den Elementen $\{\rho | 1\}$ der Gruppe $\mathcal{K}$ zugeordnet sind. In $G_0(\vec{k})$ sind die kartesischen Koordinaten $x_1^{\vec{k}}, x_2^{\vec{k}}, x_3^{\vec{k}}$ ebenfalls Basisfunktionen zu irreduziblen Darstellungen; wird der Vektor des Impulsoperators im n -ten Koordinatensystem in seine Komponenten zerlegt, so ist dadurch die Zuordnung der Funktionen $v_{m,j}^{(\mu)}$ zu entsprechenden irreduziblen Darstellungen festgelegt. Die Auswahlregeln können nun in üblicher Weise, etwa mit Hilfe der Projektionsoperatoren berechnet werden:

$$(12) \quad O_{\vec{k}^{(2)}, i i}^{(2)} \left(v_{m, j}^{(\mu)} u_{\vec{k}^{(2)}, l}^{(v)} \right) = \begin{cases} 0 \rightarrow P_{p\sigma} = 0 \\ w_{\vec{k}^{(2)}, i}^{(2)} \rightarrow P_{p\sigma} \neq 0 \end{cases}$$

Bei vorgegebenen Quantenzahlen $p \equiv \vec{k}^{(2)}, 2, i$ und $\sigma \equiv \vec{k}^{(2)}, v, l$ des Anfangs- und Endzustandes ist das Impulsmatrixelement nur für eine ganz bestimmte Funktion $v_{m, j}^{(\mu)}$ von Null verschieden, das Impulsmatrixelement hat somit im Koordinatensystem m bei gegebenen Komponenten des Anfangs- und Endzustandes nur eine von Null verschiedene Komponente längs einer der Koordinatenachsen. Damit sind auch die Winkel $\vartheta_{p\sigma}$ in Gl. (6) festgelegt. Ausführlich geschrieben lautet diese Gleichung:

$$(13) \quad E_2(\omega) = C(\omega) \frac{1}{q \cdot d_2} \sum_{m=1}^q \sum_{i=1}^{d_2} \sum_{l=1}^{d_v} \cos^2 \vartheta(\vec{k}^{(2)})_{i l}^{2v} |P(\vec{k}^{(2)})_{i l}^{2v}|^2$$

Sie beschreibt die Absorption von Licht im Kristall, hervorgerufen durch Dipolübergänge zwischen den Zuständen $E_2(\vec{k})$ und $E_v(\vec{k})$, die $q \cdot d_2$ -fach bzw. $q \cdot d_v$ -fach entartet sind.

Bei kubischer Symmetrie des Kristalls darf E_2 nicht von der Richtung des Polarisationsvektors im Kristall abhängen. Im Anhang 71 wird gezeigt, daß Gl. (13) diese Bedingung für die optische Isotropie wirklich erfüllt.

5 Diskussion der experimentellen Ergebnisse

51 Die Reflexionsmaxima des Germaniums bei 2 eV

Die Meßkurven der Fig. 3 und 4 zeigen sowohl eine Änderung des Reflexionsvermögens als auch energetische Verschiebung der Maxima. Beide Effekte kommen durch verschiedene Mechanismen zustande, sie enthalten beide Informationen über die Symmetrie der am betrachteten Übergang beteiligten Wellenfunktionen. Diese Effekte werden deshalb in diesem Kapitel nacheinander am Beispiel der Maxima des Germaniums bei 2 eV diskutiert.

Für die kombinierte Zustandsdichte zwischen dem höchsten Valenzband und dem niedrigsten Leitungsband des Germaniums hat Brust ¹²⁾ einen Satz von kritischen Punkten angegeben, der sowohl die Morse-Relationen ⁶⁾ wie auch die Symmetrie des Kristalls ⁷⁾ befriedigt. Danach sind dem Reflexionsmaximum nahe 2 eV P_2 -Sattelpunkte auf den Λ -Achsen zuzuordnen. Diese Zuordnung ist auch mit der experimentell gefundenen ¹⁷⁾ und theoretisch berechneten ⁸⁾ Spin-Bahnaufspaltung (siehe Fig. 3) in Übereinstimmung. Es soll nun diskutiert werden, ob diese Zuordnung mit den Messungen des Reflexionsvermögens von uniaxial verformten Germanium-Kristallen in Einklang steht.

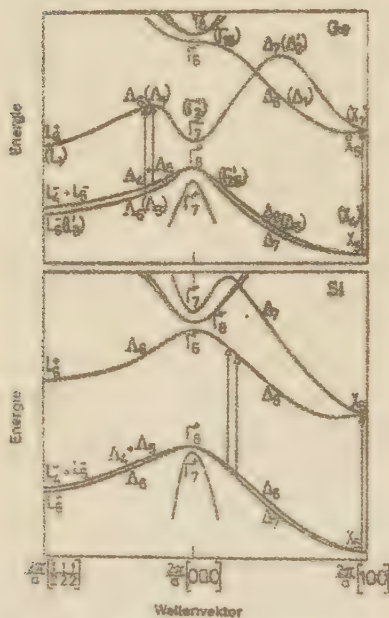


Fig. 12: Schematische Darstellung der Bandstruktur des Germaniums und des Siliziums nach Brust ¹²⁾. Die Spin-Bahnaufspaltung ¹³⁾ ist zusätzlich eingetragen. Für das Germanium sind die Bezeichnungen der Bänder ohne Spin-Bahnaufspaltung in Klammern zusätzlich angegeben. Die Pfeile markieren die in dieser Arbeit untersuchten Übergänge.

Die Klassifizierung der Energiezustände des Valenz- und Leitungsbandes wird hier wegen der großen Spin-Bahnaufspaltung nach den entsprechenden irreduziblen Darstellungen der Doppelgruppen ²³⁾ vorgenommen (Bezeichnungen nach Koster ²²⁾), d.h. für Λ -Übergänge nach den irreduziblen Darstellungen der Doppelgruppe C_{2v} . In Fig. 12 sind die Zustände schematisch angegeben; wie zu sehen ist, bilden die Basisfunktionen zu den eindimensionalen Darstellungen A_4 und A_5 einen Zustand. Das ist eine Folge der Kramersentartung aller Zustände im Kristall mit Diamantstruktur, dessen Punktgruppe O_h die Inversion als Symmetrieelement besitzt.

Mit Hilfe der Charakterentafel, Tab. I, der Gruppe C_{3v}' werden nun die Auswahlregeln für die Matrixelemente (11) berechnet. Tab. II

C_{3v}'	E	$\bar{E}$	$2C_3$	$2\bar{C}_3$	$3C_2$	$3\bar{C}_2$	Basis
Λ_1	1	1	1	1	1	1	z
Λ_2	1	1	1	1	-1	-1	
Λ_3	2	2	-1	-1	0	0	x, y
Λ_4	1	-1	-1	1	i	-i	
Λ_5	1	-1	-1	1	-i	i	
Λ_6	2	-2	1	-1	0	0	

Tab. I : Die Charaktere der Gruppe C_{3v}'

	Λ_4	Λ_5	Λ_6
Λ_4	π		σ
Λ_5		π	σ
Λ_6	σ	σ	π, σ

Tab. II : Die Auswahlregeln für Λ - Übergänge

zeigt das Ergebnis. Hier bedeutet π bzw. σ , daß die z-, bzw. x, y-Komponenten des Matrixelements (11) für den betrachteten Übergang von Null verschieden sind, wobei z und x, y Basisfunktionen zu Λ_1 und Λ_3 von C_{3v}' sind. Die Koordinaten x und y bilden also einen Satz von Basisfunktionen zu Λ_3 . Aus den Überlegungen im Anhang 71 folgt dann, daß die Summe aller Absolutquadrate von x- und y-Komponenten der Impulsmatrixelemente gleich sein müssen, d.h. es muß Gl. (a6) mit $h = x$ und $f = y$ gelten. Zur Abkürzung wird

$$(14) \quad |P_1|^2 = |P_2|^2 = \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma^2; \quad |P_3|^2 = \pi^2$$

gesetzt. Die Gl. (13) läßt sich dann analog zu (a2) in der Form

$$(15) \quad E_2 = C \frac{1}{q d_1} \sum_{m=-1}^q \left(\pi^2 \omega^2 \mathcal{J}_z^{im} + \sigma_x^2 \omega^2 \mathcal{J}_x^{im} + \sigma_y^2 \omega^2 \mathcal{J}_y^{im} \right)$$

schreiben.

Es wird nun der Einfluß einer uniaxialen Verformung in Richtung der $[001]$ -Achse betrachtet. Eine solche Verformung hat auf alle $[111]$ -Achsen die gleiche Wirkung. Da das Kristallgitter und das reziproke Gitter zur gleichen Kristallklasse gehören, muß dies auch für alle Λ -Achsen zutreffen, der Stern des $\vec{k}$ -Vektors hat also für den in $[001]$ -Richtung verformten Kristall ebenso acht Arme wie für den unverformten Kristall. Da außerdem die Inversionssymmetrie bei der elastischen Verformung erhalten bleibt, die Kramersentartung somit nicht aufgehoben wird, ist der Entartungsgrad der betrachteten Zustände für den verformten und unverformten Kristall derselbe, nämlich $d_{\Lambda q} = 2 \cdot 8 = 16$. Für den verformten Kristall hat der Ausdruck für ε_2 also die Form der Gl. (15), wobei alle darin auftretenden Größen durch die Verformung gegenüber den entsprechenden Größen des ungestörten Kristalls abgeändert sein können. Die Änderung von ε_2 wird also durch eine Änderung der kombinierten Zustandsdichte, der Matrixelemente und der Winkel zwischen dem Polarisationsvektor und ausgezeichneten Kristallachsen zustande kommen. Diese Änderung von ε_2 wird außerdem von der Orientierung des Polarisationsvektors zur Spannungsachse abhängen. In erster Näherung hängt die Änderung von ε_2 linear von den aufgeführten Größen ab. Wenn δ die Änderung einer Größe infolge der Verformung bezeichnet, gilt dann

$$(16) \quad \delta \varepsilon_2 = \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial c} \delta c + \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial \pi} \delta \pi + \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial \sigma_x} \delta \sigma_x + \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial \sigma_y} \delta \sigma_y + \sum_{m=1}^8 \left[\frac{\partial \varepsilon_2}{\partial \vartheta_2^m} \delta \vartheta_2^m + \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial \vartheta_x^m} \delta \vartheta_x^m + \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial \vartheta_y^m} \delta \vartheta_y^m \right]$$

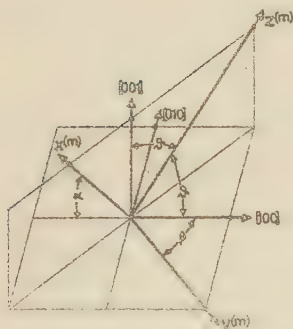


Fig. 13: Das Koordinatensystem zur Berechnung der Matrixelemente.

Im Anhang wird gezeigt, daß die Winkeländerungen höchstens das 0,03-fache der gesamten Änderung $\delta \varepsilon_2$ verursachen. Im Folgenden werden deshalb nur die ersten vier Glieder auf der rechten Seite von Gl. (16) betrachtet.

Durch die Spannungsachse und die betrachtete Achse z'' ist im Kristall eine Ebene festgelegt. Die beiden zu z'' senkrechten Achsen werden so gewählt, daß x'' in dieser Ebene liegt, die y'' -Achse ist dann

Normale auf der Ebene (siehe Fig. 13). Im ungestörten Fall ergeben sich für die Orientierung des Polarisationsvektors $\vec{a}$ parallel ($\parallel$) und senkrecht ($\perp$) zur Spannungsachse aus (15) die beiden Gleichungen

$$(17) \quad \vec{a} \parallel [001] ; \quad \varepsilon_{2\parallel} = \frac{\varepsilon}{2} (\tau^1 \omega^1 \beta + \sigma_x^1 \omega^1 \beta) = \frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{1}{3} \tau^1 + \frac{2}{3} \sigma_x^1 \right)$$

$$(18) \quad \vec{a} \perp [001] ; \quad \varepsilon_{2\perp} = \frac{\varepsilon}{2} (\tau^1 \omega^1 \beta + \sigma_x^1 \omega^1 \alpha + \sigma_y^1 \omega^1 \beta) = \frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{1}{3} \tau^1 + \frac{1}{3} \sigma_x^1 + \frac{1}{3} \sigma_y^1 \right)$$

Im ungestörten Kristall gilt wegen $\sigma_x = \sigma_y$ die Beziehung $\varepsilon_{2\parallel} = \varepsilon_{2\perp}$, der Kristall verhält sich also optisch isotrop. Die gleiche Beziehung ergibt sich aus der allgemeinen Formel (a 9) im Anhang 71. Die Änderungen $\delta \varepsilon_{2\parallel}$ und $\delta \varepsilon_{2\perp}$ werden wegen (16) in der diskutierten Näherung durch

$$(19) \quad \delta \varepsilon_{2\parallel} = \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial c} \delta c + \frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{2}{3} \tau \delta \tau + \frac{4}{3} \sigma \delta \sigma_x \right)$$

$$(20) \quad \delta \varepsilon_{2\perp} = \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial c} \delta c + \frac{\varepsilon}{2} \left(\frac{2}{3} \tau \delta \tau + \sigma \left[\frac{1}{3} \delta \sigma_x + \delta \sigma_y \right] \right)$$

dargestellt. Die hier auftretende Änderung der Matrixelemente ist eine Folge der Symmetrieeerniedrigung. Von den Elementen der Gruppe C_{4v} des ungestörten Kristalls bleiben bei $[001]$ -Störung nur noch die Spiegelung an der durch $[001]$ und 2 festgelegten Ebene und die Einheit erhalten. Diese beiden Elemente bilden die Gruppe C_2 , die zwei eindimensionale irreduzible Darstellungen besitzt. Die Koordinaten x, y bilden deshalb keinen Satz von Basisfunktionen mehr. Daraus folgt für den gestörten Kristall $\sigma_x \neq \sigma_y$.

Für den Vergleich der Änderungen der optischen Konstanten (19), (20) mit den gemessenen Änderungen des Reflexionsvermögens ist es not-

wendig, den Zusammenhang zwischen ε_1 , ε_2 und R zu untersuchen. Eine Änderung $\delta\varepsilon_2$ im Imaginärteil der Dielektrizitätskonstante erfordert über die Kramers-Krönig-Beziehung eine Änderung $\delta\varepsilon_1$ im Realteil; beide zusammen ergeben über

$$(21) \quad \delta R = \frac{\partial R}{\partial \varepsilon_1} \delta \varepsilon_1 + \frac{\partial R}{\partial \varepsilon_2} \delta \varepsilon_2$$

die Änderung des Reflexionsvermögens. Unter der Annahme, daß die Beziehung zwischen $\delta\varepsilon_1$ und $\delta\varepsilon_2$ näherungsweise linear ist, läßt sich (21) durch

$$(22) \quad \delta R = K \delta \varepsilon_2 ; \quad K = \text{const.}$$

ersetzen. Sie gestattet eine direkte Verknüpfung der Meßwerte mit den Gln. (19) und (20).

Aus den Meßkurven der Fig. 3 sind die Größen $R_1 - R_2 = \delta R_1 - \delta R_2$ für Zugverformung und Druckverformung entnommen und in Fig. 14 aufgetragen. Die entsprechenden Größen für ε_2 berechnen sich aus (19) und (20) für den Übergang $\alpha \hat{=} \Lambda_4 + \Lambda_5 \rightarrow \Lambda_4$ zu

$$(23) \quad \delta \varepsilon_{2\parallel}^1 - \delta \varepsilon_{2\perp}^1 = \frac{\varepsilon_1^1}{2} \varepsilon^1 (\delta \varepsilon_x^1 - \delta \varepsilon_y^1)$$

und für den Übergang $\Lambda \hat{=} \Lambda_4 \rightarrow \Lambda_5$ zu

$$(24) \quad \delta \varepsilon_{2\parallel}^2 - \delta \varepsilon_{2\perp}^2 = \frac{\varepsilon_1^2}{2} \varepsilon^2 (\delta \varepsilon_x^2 - \delta \varepsilon_y^2)$$

Der experimentell bestimmte Verlauf $R_{\parallel} - R_{\perp} = f(\omega)$ entspricht einer Überlagerung der Ausdrücke (23) und (24), wobei in

der Nähe der beiden Reflexionsmaxima der Beitrag jeweils eines Übergangs (a oder b) überwiegt.

Charakteristisch für die Meßkurven $R_0 - R_L$ der Fig. 14 ist ihre Spiegelsymmetrie zur Energieachse bei der Umkehr des Vorzeichens

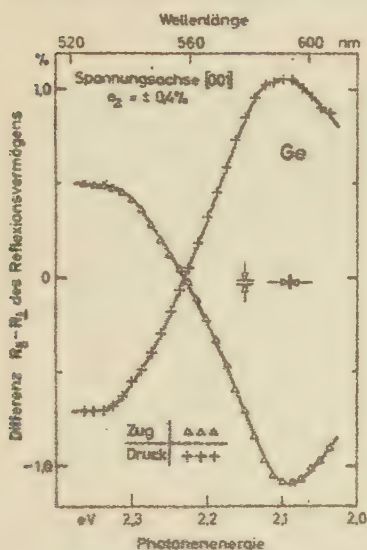


Fig. 14: Die Differenz des Reflexionsvermögens von Germanium nahe 2 eV und senkrechter Polarisation für die Spannungsachse $[001]$ bei den beiden Dehnungen $\epsilon_2 = \pm 0,4\%$. Die Kurven sind der Fig. 3 entnommen.

Zug- und Druckverformung $R_0^Z = R_L^Z$ und $R_0^D = R_L^D$. Falls bei dieser Energie die Änderung des Reflexionsvermögens infolge der Änderung der kombinierten Zustandsdichte klein wäre, müßte

$$(25) \quad R_0^Z = R_L^Z = R_0^D = R_L^D = R$$

gelten, alle fünf Kurven der Fig. 3 müßten sich bei dieser Energie in einem Punkt schneiden. In Fig. 3 sind versuchsweise alle Kurven

der Verformung. Die durch die Änderung der Matrixelemente hervorgerufene Änderung von ϵ_1 hängt also im Rahmen der Meßgenauigkeit wirklich linear von der Verformung ab. Dieses Ergebnis rechtfertigt den linearen Ansatz (16), soweit er die Abhängigkeit von den Änderungen der Matrixelemente beschreibt. Außerdem folgt daraus, daß die Größen $\delta\epsilon_x$ und $\delta\epsilon_y$ selbst linear von der Verformung abhängen.

Megen der Energieabhängigkeit von $R_0 - R_L$ müssen die Ausdrücke (23) und (24) bei einem festen Verformungszustand verschiedenen Vorzeichen haben. Im Gebiet zwischen den beiden Maxima gibt es dann eine Energie, bei der die Beiträge von (23) und (24) entgegengesetzt gleich sind. Bei dieser Energie ist für

bei 2,23 eV zum Schnitt gebracht worden. Vergleicht man in diesem Fall die Lage der Maxima bei 2,1 eV miteinander, so ergeben sich mit der absoluten Genauigkeit von $\pm 0,015 \%$ folgende Beziehungen:

$$(26) \quad R_1^2 - R = -2[R_1^0 - R] = -[R_1^2 - R] = +2[R_1^2 - R]$$

Die Gültigkeit dieser einfachen Beziehungen läßt den Schluß zu, daß die Wahl des Schnittpunktes berechtigt ist. Daraus folgt, daß die Änderung der kombinierten Zustandsdichte an dieser Stelle vernachlässigbar ist. Nimmt man an, daß dies auch im Bereich der Maxima der Fall ist, so kann man wegen (22) sofort von (26) zu den Änderungen in ε_2 übergehen, die allein durch die Änderung der Matrixelemente verursacht werden. Aus (19) und (20) folgt für Druck- und Zugspannung

$$(27) \quad \pi^k \delta \pi^k + \varepsilon^2 (\delta \varepsilon_x^k + \delta \varepsilon_y^k) = 0$$

Falls das Maximum bei 2,1 eV durch den Übergang $\Lambda_4 + \Lambda_5 \rightarrow \Lambda_6$ verursacht wird, ist wegen der in Tab. II angegebenen Auswahlregeln $\pi^z = 0$, (27) vereinfacht sich in diesem Fall zu

$$(28) \quad \delta \varepsilon_x^z + \delta \varepsilon_y^z = 0$$

Für die Änderungen des maximalen Reflexionsvermögens bei 2,3 eV lassen sich ganz analoge Betrachtungen anstellen. Das Maximum ist allerdings wesentlich schwächer ausgeprägt, man wird deshalb einen größeren Meßfehler erwarten. Die Gl. (26) ist hier mit der absoluten Genauigkeit von $\pm 0,08 \%$ erfüllt, gegenüber $\pm 0,015 \%$ bei 2,1 eV.

Im Folgenden sollen die aus dem experimentellen Ergebnis (26) abgeleiteten Formeln (27) und (28) diskutiert werden.

Zur Deutung der Zyklotronresonanzmessungen an uniaxial verformten Silizium-Kristallen ²⁴⁾ hat Hasegawa ²⁵⁾ für das Valenzband bei $\vec{k} = 0$ mit Hilfe einer Störungsrechnung die Änderung der effektiven Masse bestimmt. Er findet dabei, daß die Spur des Tensors der effektiven Masse durch eine Verformung beliebiger Richtung und Größe nicht geändert wird, obwohl die einzelnen Diagonalglieder merklich von den Komponenten des Dehnungstensors abhängen. Wenn wieder δ die durch die Verformung verursachte Änderung einer Größe bezeichnet, so läßt sich dieser Satz in der Form

$$(29) \quad \sum_{i=1}^3 \delta \left(\frac{m}{m^*} \right)_i = \sum_{i=1}^3 \frac{m}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_r}{\partial k_i^2} = \frac{m}{\hbar^2} \Delta_{\vec{k}} E_r = 0$$

ausdrücken. Der f-Summensatz verknüpft nun die Komponenten des Tensors der effektiven Masse mit den Impulsmatrixelementen. Setzt man voraus, daß alle Bänder am betrachteten Punkt im $\vec{k}$ -Raum bis auf die Kramersentartung nicht entartet sind, so lautet er für die i-te Komponente

$$(30) \quad \frac{m}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E_r}{\partial k_i^2} = 1 + \frac{2}{m} \sum_s \frac{|P_{rs}^{(i)}|^2}{E_r - E_s} = 1 + \frac{2}{m} \sum_s \frac{(M_{rs}^{(i)})^2}{E_r - E_s} \quad (|P_{rs}^{(i)}| = \hbar M_{rs}^{(i)})$$

Für die Absolutquadrate der Impulsmatrixelemente bei Verformung ist in erster Näherung

$$(31) \quad (M_{rs}^{(i)} + \delta M_{rs}^{(i)})^2 = (M_{rs}^{(i)})^2 + 2 M_{rs}^{(i)} \delta M_{rs}^{(i)}$$

zu schreiben. Damit nimmt der Summensatz von Hasegawa die Form

$$(32) \quad \frac{2}{m} \sum_{i=1}^3 \sum_s \frac{2 M_{rs}^{(i)} \delta M_{rs}^{(i)}}{E_r - E_s} = 0$$

an. Diese Gleichung ist erfüllt, wenn für jedes Bandpaar r, s die Beziehung

$$(33) \quad \sum_{i=1}^3 M_{rs}^{(i)} \delta H_{rs}^{(i)} = 0$$

gilt. (33) ist mit den aus den Messungen abgeleiteten Beziehungen (27) und (28) identisch, die somit ebenfalls die Gl. (29) bzw. (32) befriedigen.

Diesen Überlegungen kann man allerdings nicht entnehmen, daß die Beziehungen (29) und (33) streng gelten. Möglicherweise muß man beide oder eine von beiden als Näherungsformeln betrachten, deren Gültigkeitsbereich die Meßgenauigkeit einschließt.

Die Zuordnung der beiden Reflexionsmaxima zu den Übergängen a und b kann man aus den vorliegenden Messungen noch nicht treffen. Sie läßt sich erst vornehmen, wenn die Änderungen der Matrixelemente nach Größe und Vorzeichen bekannt sind, sie können dann mit den gemessenen Änderungen des Reflexionsvermögens verglichen werden.

Mit Hilfe der Gl. (33) bzw. den analogen Gln. (27) und (28) können die Ausdrücke (19), (20) und (23) für die Änderung von ε_i vereinfacht werden. Für den Übergang $a \hat{=} A_4 + A_5 \rightarrow A_6$ gilt

$$(34) \quad \delta \varepsilon_{21}^a = \frac{\partial \varepsilon_2^a}{\partial c} \delta c^a + \frac{c^a}{2} \cdot \frac{4}{3} G^a \delta G_x^a$$

$$(35) \quad \delta \varepsilon_{21}^a = \frac{\partial \varepsilon_2^a}{\partial c} \delta c^a - \frac{c^a}{2} \cdot \frac{2}{3} G^a \delta G_x^a$$

$$(36) \quad \delta \varepsilon_{14}^a - \delta \varepsilon_{21}^a = \frac{c^a}{2} \cdot 2 G^a \delta G_x^a$$

Entsprechend wird für $\lambda \approx \Lambda_1 \rightarrow \Lambda_2$

$$(37) \quad \delta \varepsilon_{14}^4 = \frac{\partial \varepsilon_1^4}{\partial c} \delta c^4 + \frac{\varepsilon_1^4}{2} \cdot \frac{2}{3} \varepsilon^4 (\delta \varepsilon_x^4 - \delta \varepsilon_y^4)$$

$$(38) \quad \delta \varepsilon_{21}^4 = \frac{\partial \varepsilon_2^4}{\partial c} \delta c^4 - \frac{\varepsilon_2^4}{2} \cdot \frac{1}{3} \varepsilon^4 (\delta \varepsilon_x^4 - \delta \varepsilon_y^4)$$

Zusammen mit der Gl. (24), die sich nicht weiter vereinfachen läßt, bestimmen diese Beziehungen die Änderung von ε_2 für die Polarisationen parallel und senkrecht zur Spannungsachse. Über (22) beschreiben sie damit die gemessenen Änderungen des Reflexionsvermögens bei uniaxialer Verformung in $[001]$ -Richtung, d.h. die Kurven der Fig. 3 und 14.

Die uniaxiale Verformung in Richtung der $[111]$ -Achse hebt die Entartung infolge der acht gleichberechtigten $\vec{\Lambda}$ -Vektoren des Sterns teilweise auf: Der Stern zerfällt in zwei neue Sterne mit zwei bzw. sechs Armen. Die Gleichung für $\delta \varepsilon_2$ kann deshalb nicht mehr in der Form (16) aufgestellt werden, sondern wird wesentlich komplizierter. Die Änderungen des Reflexionsvermögens werden deshalb für die Spannungsachse $[111]$ nicht diskutiert.

512 Die energetische Lage der Reflexionsmaxima bei elastischer Deformation

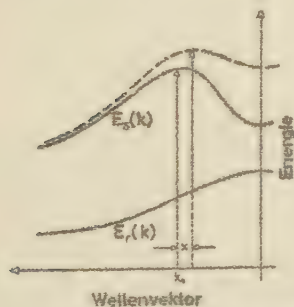


Fig. 15: Schematische Darstellung der Verschiebung eines kritischen Punktes infolge einer Bandverschiebung.

Wie zu Beginn dieser Diskussion vorausgesetzt, werden die beiden Reflexionsmaxima des Germaniums durch je acht Sattelpunkte hervorgerufen. Bei einer elastischen Verformung des Kristalls werden die Bänder an verschiedenen Stellen im $\vec{k}$ -Raum verschieden stark beeinflusst ¹¹⁾. In Fig. 15 sind die Bänder des Germaniums (siehe Fig. 12) in Richtung der $\vec{\Lambda}$ -Achse nochmals skizziert. Eine mögliche Verschiebung des Leitungsbandes durch eine elastische Verformung ist gestrichelt

eingetragen. Falls diese Verschiebung von $\vec{k}$ abhängt, wird der kritische Punkt im $\vec{k}$ -Raum wandern. Mißt man im verformten Kristall die energetische Lage des kritischen Punktes, so gehört zu diesem kritischen Punkt ein anderer $\vec{k}$ -Vektor als für den kritischen Punkt des ungestörten Kristalls. Mit den Bezeichnungen E_s^0 und E_v^0 für die Energie des Leitungs- und Valenzbandes des ungestörten Kristalls, E_s und E_v entsprechend für den gestörten Kristall und $E_s^0 - E_v^0 = D^0$, $E_s - E_v = D$ wird die gemessene Energieverschiebung

$$(39) \quad \delta D = D(\vec{k}_0 + \vec{k}) - D^0(\vec{k}_0)$$

$\vec{k}_0$ bezeichnet die Lage des kritischen Punktes im ungestörten Fall, $\vec{k}_0 + \vec{k}$ die Lage bei elastischer Verformung. Beschränkt man sich der Einfachheit halber auf eine Dimension, so kann man folgende Taylor-entwicklungen aufschreiben:

$$(40) \quad D(k_0 + k) = D(k_0) + D'(k_0)k + D''(k_0)\frac{k^2}{2} + \dots$$

$$(41) \quad D'(k_0 + k) = D'(k_0) + D''(k_0)k + \dots = 0$$

In Gl. (41) wurde die Tatsache ausgenutzt, daß bei $k_0 + k$ der Sattelpunkt für den verformten Kristall liegt. Eliminiert man mit Hilfe von (41) k aus (40) und setzt dann in (39) ein, so wird

$$(42) \quad \delta D = D(k_0) - D^0(k_0) - \frac{1}{2} \frac{[D'(k_0)]^2}{D''(k_0)} = \delta E(k_0) - \frac{1}{2} \frac{[D'(k_0)]^2}{D''(k_0)}$$

$\delta E(k_0)$ ist die Änderung der Energiedifferenz zwischen Leitungs- und Valenzband am Ort des ursprünglichen kritischen Punktes. Das letzte Glied der rechten Seite kommt durch das Wandern des kritischen Punktes zustande; wegen $D'(k_0) = 0$ ist es hauptsächlich durch die Größe

$D'(k_0)$ bestimmt, $D'(k_0)$ kann dagegen in guter Näherung durch $D''(k_0)$ ersetzt werden. Setzt man in erster Näherung an, daß der Energieabstand der Bänder und die Differenz ihrer Steigungen an jedem Punkt im k -Raum linear von der Verformung abhängen, so setzt sich die gemessene Verschiebung δD aus einem linearen und einem quadratischen Anteil zusammen. Der quadratische Anteil ruht vom Wandern des kritischen Punktes im k -Raum her. Er läßt sich durch Differenzbildung zwischen den Energieverschiebungen bei Zug- und Druckverformung eliminieren:

$$(43) \quad \delta D^2 - \delta D^D = \delta E^2 - \delta E^D = 2 \delta E^2$$

Der Anteil δE wird im allgemeinen linear von allen sechs Komponenten des Dehnungstensors abhängen, d.h. es treten sechs Koeffizienten auf, welche die Konstanten des Deformationspotentials genannt werden (26), (27), (28). Liegt der Vektor $\vec{k}_0$ auf Symmetriachsen der Brillouinzone, so genügen zur Beschreibung der Verschiebung $\delta E(\vec{k}_0)$ zwei unabhängige Konstanten. Zum n -ten Vektor des $\vec{k}_0$ -Sterns gehören dann folgende Energieverschiebungen des Valenz- und Leitungsbandes (28):

$$(44) \quad \delta E_v(\vec{k}_0^m) = \vec{m} \cdot \left[E_{vc} \underline{1} \text{ Spur } \underline{\underline{\epsilon}} + E_{vc} \left(\underline{\underline{\epsilon}} - \underline{1} \cdot \frac{1}{3} \text{ Spur } \underline{\underline{\epsilon}} \right) \right] \cdot \vec{m}$$

$$(45) \quad \delta E_c(\vec{k}_0^m) = \vec{m} \cdot \left[E_{cv} \underline{1} \text{ Spur } \underline{\underline{\epsilon}} + E_{cv} \left(\underline{\underline{\epsilon}} - \underline{1} \cdot \frac{1}{3} \text{ Spur } \underline{\underline{\epsilon}} \right) \right] \cdot \vec{m}$$

Hier ist $\vec{m}$ der Einheitsvektor in Richtung von $\vec{k}_0^m$, $\underline{\underline{\epsilon}}$ der Dehnungstensor und $\underline{1}$ die Einheitsmatrix. Die Konstanten E_{vc} , E_{cv} beschreiben die Energieverschiebung infolge einer Volumenänderung, E_{ic} , E_{iv} liefern die Aufspaltung des ohne Störung q -fach entarteten Energieniveaus, wobei q die Zahl der verschiedenen $\vec{k}_0^m$ Vektoren des Sterns ist. Die Konstante E_{iv} hängt mit den von Herring und Vogt (27) benutzten Konstanten Ξ_{iv} , Ξ_{iv} über $E_{iv} = \Xi_{iv} + \frac{1}{3} \Xi_{iv}$ zusammen. In

Gl. (45) beschreibt das positive bzw. negative Vorzeichen die Verschiebung des Valenzbandes mit der großen bzw. kleinen effektiven Masse bei $\vec{k} = 0$.

Die uniaxiale Verformung in Richtung der $[001]$ -Achse bewirkt wegen (44) und (45) eine Energieverschiebung der Bänder an den Λ -Punkten im $\vec{k}$ -Raum, die allein durch die Volumenänderung bestimmt ist. Aus der gemessenen Energieverschiebung läßt sich somit die Differenz $E_{\Lambda c}^{\Lambda} - E_{\Lambda v}^{\Lambda}$ bestimmen. Der Spannungstensor besitzt in diesem Fall nur die Komponente G_z , die von Null verschiedenen Komponenten des Dehnungstensors sind ϵ_z , $\epsilon_x = \epsilon_y = \frac{\epsilon_z}{2} \epsilon_z$. ϵ_{11} und ϵ_{12} sind zwei der elastischen Konstanten des Kristalls, ϵ_z die gemessene Komponente des Dehnungstensors in Richtung der Spannungsachse. Aus den Gln. (44), (45) folgt somit

$$(46) \quad \delta E(\vec{k}_0) = \delta E_s(\vec{k}_0) - \delta E_v(\vec{k}_0) = (E_{\Lambda c}^{\Lambda} - E_{\Lambda v}^{\Lambda}) \left(1 + \frac{2\epsilon_{11}}{\epsilon_{12}}\right) \epsilon_z$$

Zur Ermittlung von $\delta E(\vec{k}_0)$ aus den Meßkurven der Fig. 3 wird Gl. (43) angewandt. Dabei tritt folgende Schwierigkeit auf: Wegen der starken Änderung des Reflexionsvermögens beim Vorzeichenwechsel der Verformung und fester Polarisationsrichtung ($\Delta R \approx 1,4\%$ für das Maximum bei 2,1 eV, Polarisierung parallel zur Spannungsachse und $\epsilon_z = \pm 0,4\%$) ändert sich die Kurvenform im Bereich des betrachteten Maximums, die Energieverschiebung der Kurven gegeneinander kann nur ungenau angegeben werden. Diese Schwierigkeit läßt sich umgehen, indem man der Fig. 3 die Verschiebung der Zug- und Druckkurven gegeneinander bei verschiedenen Polarisationsrichtungen entnimmt. Die Maxima dieser Kurven und ihre Form unterscheiden sich nur wenig, die Verschiebung kann mit höherer Genauigkeit bestimmt werden. Wegen der ausgeprägten Struktur wird nur das Maximum bei 2,1 eV betrachtet. Diesem entnimmt man

$$(47) \quad \delta E_{\eta}^z - \delta E_{\eta}^D = -21,5 \text{ meV}, \quad \delta E_{\perp}^z - \delta E_{\eta}^D = -20,5 \text{ meV}$$

Der Unterschied von 5 % zwischen beiden Werten kann noch teilweise von den etwas verschiedenen Kurvenformen der betrachteten Zug- und Druckkurven herrühren. Mit Gl. (43) ergibt sich im Mittel

$$(48) \quad \delta E^2 = (-10,5 \pm 0,25) \text{ eV} \quad \text{für} \quad \epsilon_z = (+0,4 \pm 0,02) \%$$

Beim Einsetzen dieser Werte und der elastischen Konstanten ²⁹⁾ in die Gl. (46) folgt

$$(49) \quad E_{\lambda c}^A - E_{\lambda v}^A = -5,7 \text{ eV} \pm 5\%$$

Philipp, Dash und Ehrenreich ⁹⁾ hatten ihren Messungen mit unpolarisiertem Licht $E_{\lambda c}^A - E_{\lambda v}^A = -7 \text{ eV}$ entnommen^{*)}. Messungen an Kristallen unter hydrostatischem Druck ⁹⁾ liefern $E_{\lambda c}^A - E_{\lambda v}^A = -5,7 \text{ eV}$, in vollkommener Übereinstimmung mit dem hier ermittelten Wert.

Für eine uniaxiale Verformung in Richtung der $[111]$ -Achse hängt jetzt die Energieverschiebung der Kurven gegeneinander von der Orientierung des Polarisationsvektors zur Spannungsachse ab, wie der Fig. 4 zu entnehmen ist. Dieses Verhalten ist auf Grund der Gln. (15) und (44), (45) zu erwarten. Zunächst ergibt sich aus Fig. 4, daß der energetische Abstand der beiden Maxima, 0,1315 eV für den ungestörten Kristall, durch die Verformung im Rahmen der Meßgenauigkeit nicht geändert wird. In den Gln. (44) und (45) kann deshalb E_{2v} gegenüber E_{1c} vernachlässigt werden, woraus dann die Gln.

$$(50) \quad \delta E(\vec{k}_\perp) = 3(E_{\lambda c}^A - E_{\lambda v}^A) \epsilon_{xx} + 2E_{1c}^A \epsilon_{yz} \quad \text{für} \quad \vec{k}_\perp \parallel [111]$$

*) Die Autoren geben den Betrag dieser Größe an. Das negative Vorzeichen folgt aus der Richtung der experimentellen Verschiebung und der Gl. (1) der zitierten Arbeit, die den Gln. (44) und (45) der vorliegenden Arbeit entspricht.

$$(51) \quad \delta E(\vec{k}_0) = 3(E_{1c}^A - E_{1v}^A) \epsilon_{xx} - \frac{2}{3} E_{2c}^A \epsilon_{yz} \quad \text{für } \vec{k}_0 \parallel [\bar{1}11], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [11\bar{1}]$$

folgen. Hierbei ist die Symmetrie der Störung benutzt worden, welche für die Komponenten des Dehnungstensors bezüglich der Kristallachsen $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz}$ und $\epsilon_{yz} = \epsilon_{zy} = \epsilon_{xy}$ fordert.

Zunächst wird die Orientierung des Polarisationsvektors parallel zur Spannungsachse betrachtet. Bei verschwindender Störung ist dann wegen Gl. (15) der Beitrag von Übergängen zwischen Zuständen mit $\vec{k}_0 \parallel [111]$ zu ϵ_z

$$(52) \quad \epsilon_{z\parallel}^{(1)} = \frac{\epsilon}{2} \cdot \frac{1}{4} \pi^2$$

Entsprechend gilt für den Beitrag von Übergängen mit $\vec{k}_0 \parallel [\bar{1}11], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [11\bar{1}]$

$$(53) \quad \epsilon_{z\parallel}^{(2)} = \frac{\epsilon}{2} \left(\frac{1}{12} \pi^2 + \frac{2}{3} \sigma^2 \right); \quad \epsilon_{z\parallel} = \epsilon_{z\parallel}^{(1)} + \epsilon_{z\parallel}^{(2)}$$

Für den Übergang a ist $\pi = 0$ und $\epsilon_{z\parallel} = \epsilon_{z\parallel}^{(2)}$. Eine analoge Beziehung kann für den Übergang b nicht aufgestellt werden, weil das Verhältnis der π - und σ -Matrixelemente unbekannt ist. Die Änderung der Matrixelemente bei Verformung ist klein, die Größen $\epsilon_{z\parallel}^{(1)}$ und $\epsilon_{z\parallel}^{(2)}$ werden auch bei starker Verformung in näherungsweise gleichem Verhältnis zu $\epsilon_{z\parallel}$ beitragen wie bei verschwindender Verformung. Für den Übergang a ist deshalb die gesamte Energieverschiebung durch Gl. (51) gegeben. Die der Fig. 4 entnommene Differenz in der energetischen Lage der Maxima für Zug- und Druckverformung ist innerhalb des Meßfehlers für die Maxima bei 2,1 eV und bei 2,3 eV gleich, sie beträgt

$$(54) \quad \delta E_{\parallel}^2 = \frac{1}{2} (\delta E_{\parallel}^2 - \delta E_{\perp}^2) = (21 \pm 2) \text{ meV}$$

Da es sich bei einem der beiden Maxima um den Übergang a handelt, folgt aus der gleichen Verschiebung der beiden Maxima, daß auch die Verschiebung des zum Übergang b gehörenden Maximums innerhalb der Meßgenauigkeit allein durch die Gl. (51) beschrieben wird. Diese enthält als einzige Unbekannte die Konstante $E_{2c}^A : E_{2c}^A = E_{4v}^A$ ist durch (49) gegeben, die Komponenten ϵ_{xx} , ϵ_{yz} des Dehnungstensors bezüglich der Kristallachsen sind über die Spannungs-Dehnungs-Beziehung mit der gemessenen Komponente ϵ_z verknüpft. ϵ_z ist die Komponente des Dehnungstensors im gestrichenen Koordinatensystem, dessen z'-Achse parallel zur Spannungsachse ist. Die Verknüpfungen lauten

$$(55) \quad \epsilon_{xx} = \frac{\epsilon_z + 2\epsilon_z}{\epsilon_z + 2\epsilon_z + \epsilon_{zz}} \epsilon_z' ; \quad \epsilon_{yz} = \frac{\frac{1}{2} \epsilon_{yz}}{\epsilon_z + 2\epsilon_z + \epsilon_{zz}} \epsilon_z'$$

Das Einsetzen der Gln. (49), (54), (55) in Gl. (51) ergibt

$$(56) \quad E_{2c}^A = + 5,1 \text{ eV} \pm 20\%$$

Philipp, Dash und Ehrenreich⁹⁾ hatten aus ihren Messungen $E_{2c}^A = 3,5 \text{ eV} \pm 100\%$ abgeschätzt.

Die den Meßkurven entnommene Energieverschiebung der Maxima bei senkrechter Polarisation ist mit

$$(57) \quad \delta E_1^2 = \frac{1}{2} (\delta E_1^2 - \delta E_1^3) = (12 \pm 2) \text{ meV}$$

deutlich geringer als die bei paralleler Polarisation. Man wird daher erwarten, daß hier ein merklicher Anteil der Energieverschiebung durch die Gl. (50) beschrieben wird. Für den Übergang a wird hier auch wirklich $\epsilon_{21}^{(a)} = \frac{2}{3} \epsilon_{21}$, $\epsilon_{21}^{(2)} = \frac{1}{3} \epsilon_{21}$, d. h. die Über-

gänge, deren Energieverschiebungen durch die Gln. (50) und (51) gegeben sind, tragen mit dem Intensitätsverhältnis 3 : 5 zur Gesamtabsorption bei. Da die Konstante E_{12}^A in beide Gleichungen mit verschiedenen Vorzeichen eingeht und in Gl. (50) gegenüber Gl. (51) mit dreifachem Gewicht auftritt, wird das experimentelle Ergebnis $\delta E_{11}^2 > \delta E_{12}^2$ qualitativ verständlich.

Damit ist die Diskussion der Änderung des Reflexionsvermögens und der Energieverschiebung der Reflexionsmaxima des Germaniums zwischen 2,0 eV und 2,4 eV abgeschlossen. Die zu Grunde liegende Voraussetzung, daß die beiden Maxima durch P_1 -Sattelpunkte auf A_1 -Achse zustande kommen, hat sich bei der Deutung aller experimentellen Ergebnisse bewährt.

52 Das Reflexionsmaximum des Siliziums bei 3,4 eV und die Maxima bei höheren Energien

Die Zuordnung des Reflexionsmaximums des Siliziums bei 3,4 eV ist bis jetzt noch nicht geklärt. Brust¹²⁾ nimmt an, daß es durch mehrere kritische Punkte nahe $\bar{K} = 0$ hervorgerufen wird, während Goroff und Kleinman³⁰⁾ vermuten, daß es sich um einen $L'_1 \rightarrow L_2$ Übergang handeln könnte.

Die Reflexionsmessungen mit unpolarisiertem Licht an uniaxial in der $[111]$ -Richtung verformten Kristallen zeigen eine Energieverschiebung ohne Änderung der Kurvenform, während die uniaxiale Verformung in der $[001]$ -Richtung eine drastische Verbreiterung der Kurven bewirkt (Fig. 5). Eine Störung in der $[001]$ -Richtung hebt also Entartungen auf, welche die am Übergang beteiligten Zustände ohne Störung besitzen, während die Entartung bei $[111]$ -Störung erhalten bleibt. Eine solche Entartung ist die sechsfache Entartung von Zuständen mit Δ -Symmetrie: Der Stern der Darstellung besteht im ungestörten Fall und bei $[111]$ -Störung aus den sechs $\bar{K}$ -Vektoren in den $\langle 100 \rangle$ -Richtungen, während er bei $[001]$ -Störung in zwei Sterne mit zwei bzw. vier $\bar{K}$ -Vektoren zerfällt. In Fig. 12 sind die Übergänge $\Delta_6 \rightarrow \Delta_6$ und $\Delta_7 \rightarrow \Delta_6$ eingetragen, die auf Grund ihrer

energetischen Lage ¹²⁾ für diesen Übergang in Frage kommen. Auf Grund des experimentellen Befundes wird in der folgenden Diskussion angenommen, daß es sich um diesen Δ -Übergang handelt.

Die Messungen mit polarisiertem Licht an verformten Kristallen mit der Spannungsachse $[001]$ (Fig. 6) zeigen an Stelle der Verbreiterung in Fig. 5 eine Verschiebung der Kurven, deren Vorzeichen bei einem festen Spannungszustand von der Polarisationsrichtung abhängt. Die Übergänge zwischen Zuständen, deren $\vec{k}$ -Vektoren $\parallel [001]$ bzw. $\parallel [100]$, $[010]$ sind, unterscheiden sich demnach experimentell durch ihr Polarisationsverhalten. Außerdem sind die Kurven mit senkrechter Polarisation, deren Maximum bei etwa gleicher Energie liegt, noch merklich verbreitert. Diese Verbreiterung ist auch in Fig. 7 bei uniaxialer Verformung mit der Achse $[111]$ zu erkennen.

Falls das betrachtete Maximum durch Δ -Übergänge verursacht würde, die genügend weit vom Zentrum der Brillouinzone entfernt sind, müßten für die Energieverschiebungen wieder die Gln. (44) und (45) gelten ²⁸⁾. Die zusätzliche Verbreiterung der Kurven bei senkrechter Polarisation würde dann für $[001]$ -Störung durch die Vergrößerung der Spin-Bahnaufspaltung des Valenzbandes zustande kommen, wie sie durch das Glied mit E_{zv} der Gl. (45) beschrieben wird. Bei $[111]$ -Störung liefert diese Gleichung allerdings keine zusätzliche Aufspaltung der Valenzbänder durch die Verformung. Das ist aber im Gegensatz zum experimentellen Ergebnis (Fig. 7). Das Reflexionsmaximum wird demnach durch Δ -Übergänge nahe $\vec{k} = 0$ hervorgerufen, für welche die Gln. (44) und (45) nicht mehr gültig sind.

Der vierfach entartete Zustand Γ_8^+ des Valenzbandes (siehe Fig. 12) spaltet bei einer uniaxialen elastischen Verformung in zwei zweifach entartete Zustände auf. Diese Aufspaltung ist sowohl theoretisch ³¹⁾ wie experimentell mit Hilfe der Zyklotronresonanz ²⁴⁾ untersucht worden. Berechnet man mit der aus der Zyklotronresonanzmessung ermittelten Konstanten des Deformationspotentials die Aufspaltung für eine Verformung von $|\epsilon_{11}| = 0,4\%$ für die Spannungsachse $[111]$, so erhält man für den energetischen Abstand der aufgespaltenen Bänder bei $\vec{k} = 0$ 17 meV. Die Verbreiterung der Kurven

bei senkrechter Polarisation gegenüber den Kurven bei paralleler Polarisation in Fig. 7 ist (10 ± 5) meV. Dieser Wert ist etwas kleiner als der oben angegebene Wert bei $\vec{k} = 0$. Da in großer Entfernung von $\vec{k} = 0$ die Aufspaltung der Valenzbänder durch eine $[111]$ -Störung nicht geändert wird, ist diese Tatsache ein weiterer Hinweis darauf, daß Δ -Übergänge nahe $\vec{k} = 0$ für das Reflexionsmaximum verantwortlich sind.

Für die Spannungsachse $[001]$ ist das Verhalten der Bänder bei Verformung für $\vec{k} = 0$ und entlang der Richtungen $[001]$ und $[100]$, $[010]$ schematisch in Fig. 16 angegeben. Die eingetragenen Auswahlregeln

sind streng für $\vec{k} = 0$ gültig. Sie sind aus den Charakteren der Gruppe D_{4h} berechnet, in welche die Gruppe O_h unter dem Einfluß einer $[001]$ -Störung übergeht. Für $\vec{k} \neq 0$ können sie nur näherungsweise gültig sein. Die Zuordnung der Übergänge bei paralleler ($\parallel$) und senkrechter ($\perp$) Polarisation zu $\vec{k}$ -Vektoren parallel zu den Richtungen $[001]$ bzw. $[100]$, $[010]$ ist den Kurven der Fig. 6 entnommen. Die aus den Zyklotronresonanzmessungen berechnete Aufspaltung der Valenzbänder bei $\vec{k} = 0$ ist für diesen Verformungszustand 14 meV. Für das zu kleineren Energien verschobene Bandpaar entnimmt man der Fig. 6 die Verbreiterung $(11,5 \pm 5)$ meV. Die gute Übereinstimmung ist an Hand der Fig. 16 verständlich. Die zu geringeren Energien verschobenen kritischen Punkte wandern noch näher auf das Zentrum der Brillouinzone zu. Für das zu höheren Ener-

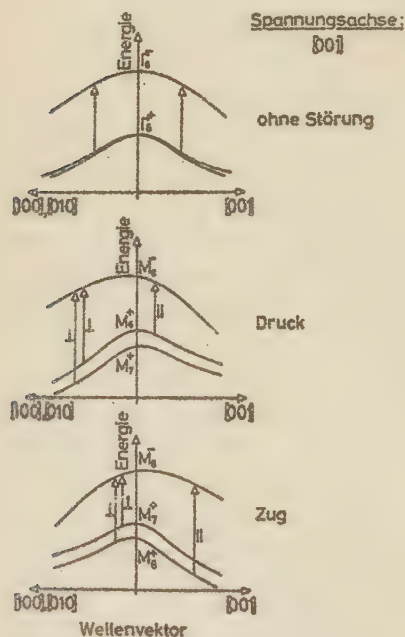


Fig. 16: Einfluß der elastischen Deformation in $[001]$ -Richtung auf die Energiebänder des Siliziums nahe $\vec{k} = 0$. Die schematisch eingetragenen Übergänge und ihr Polarisationsverhalten sind dem Experiment entnommen.

glen verschobene Bandpaar ist die Verbreiterung mit (25 ± 8) meV merklich größer. Dieses Ergebnis ist durch das Wandern der entsprechenden kritischen Punkte zu höheren $\bar{\epsilon}$ -Werten zu erklären, bei denen der vorliegende Verformungszustand eine Vergrößerung der Spin-Bahnaufspaltung bewirkt.

Die Änderung des Reflexionsvermögens bei Verformung kann im vorliegenden Fall wegen der Unsicherheit in der relativen Lage der Reflexionskurven zueinander nicht untersucht werden, da ein Vergleichsmaximum wie im Falle des Germaniums bei 2 eV fehlt.

Die Polarisierungseffekte an den beiden Maxima des Germaniums und des Siliziums bei 4,5 eV (Fig. 9 bis 11) sind nicht so ausgeprägt wie in den oben diskutierten Fällen. Dieses Ergebnis ist mit der Zuerdnung der Maxima zu kritischen Punkten mit X - und Σ -Symmetrie in Einklang ^{4), 12)}. Der Einfluß der beiden nahezu bei gleicher Energie liegenden Typen von kritischen Punkten auf die Änderung des Reflexionsvermögens überlagert sich zu dem gemessenen Effekt, aus dem sich dann rückwärts nicht mehr eindeutig auf den Einfluß der einzelnen kritischen Punkte schließen läßt. Allerdings ist bemerkenswert, daß die Energieverschiebung der Kurven des Siliziums bei [111]-Störung (Fig. 10) für beide Polarisationsrichtungen gleich ist. Ein solches Verhalten ist zu erwarten, wenn zu diesem Maximum überwiegend kritische Punkte mit X -Symmetrie beitragen. In der zitierten früheren Mitteilung ¹⁸⁾ war unter dieser Voraussetzung die Konstante $E_v^X - E_v^{\Sigma} = - (2,7 \pm 0,5)$ eV ^{*)} des Deformationspotentials aus der mit unpolarisiertem Licht gemessenen Verschiebung ermittelt worden. Die Verschiebungen der Fig. 10 liefern den gleichen Wert. Dieser Wert stimmt mit dem von Geroff und Kleinman ³⁰⁾ berechneten Wert von - 2,38 eV innerhalb der Fehlergrenze überein. Diese Übereinstimmung ist ein weiterer Hinweis darauf, daß zum Maximum des Germaniums bei 4,5 eV überwiegend kritische Punkte mit X -Symmetrie beitragen.

*) In der zitierten Mitteilung muß es richtig

$$\Delta E_v^X - \Delta E_v^{\Sigma} + \frac{1}{3} \Delta E_v^{\Sigma_u} = - (2,7 \pm 0,5) \text{ eV} \quad \text{heißten.}$$

6 Zusammenfassung

Die Änderung des Reflexionsvermögens von Germanium- und Silizium-Einkristallen unter uniaxialer elastischer Deformation wird im Bereich der direkten optischen Übergänge bei Zimmertemperatur gemessen. Die Diskussion bestätigt die Zuordnung der Reflexionsmaxima des Germaniums bei 2 eV zu P_1 -Sattelpunkten mit Δ -Symmetrie, sie legt die Zuordnung des Reflexionsmaximums des Siliziums bei 3,4 eV zu kritischen Punkten mit Δ -Symmetrie nahe dem Zentrum der Brillouinzone fest. Das Reflexionsmaximum des Siliziums bei 4,5 eV ist wahrscheinlich überwiegend durch kritische Punkte mit X-Symmetrie bestimmt. Die Änderung des Reflexionsvermögens der Maxima des Germaniums bei 2 eV erweist sich als eine Folge der Änderung der Übergangsmatrixelemente. Aus den Messungen läßt sich ein Summensatz formulieren: Die Summe der Absolutquadrate der Vektoren dieser Matrixelemente, summiert über alle Vektoren, bleibt bei uniaxialer elastischer Verformung ungeändert. Die aus den Messungen ermittelten Konstanten der Deformationspotentiale sind in Tab. III zusammengefaßt.

Material	Lage des Maximums	Konstante des Deformationspotentials
Ge	2,1 eV	$E_{1c}^{\Delta} - E_{1v}^{\Delta} = -5,7 \text{ eV} \pm 5\%$ $E_{2c}^{\Delta} = +5,1 \text{ eV} \pm 20\%$
Si	4,5 eV	$E_{1c}^X - E_{1v}^X = -2,7 \text{ eV} \pm 20\%$

Tab. III : Die Konstanten des Deformationspotentials

In mehreren Diskussionen habe ich wertvolle Anregungen zum theoretischen Teil dieser Arbeit erhalten. Dafür danke ich insbesondere Herrn Professor Dr. H. Bilz und seinen Mitarbeitern und Herrn Diplomphysiker H. Leonhardt. Herr Leonhardt hat mich unter anderem auf die im Anhang 71 durchgeführte Rechnung hingewiesen. Den Mitgliedern der Institutswerkstatt danke ich für die sorgfältige

Durchführung der feinmechanischen Arbeiten. Herr Professor Dr. W. Martienssen hat diese Arbeit angeregt. Für seine vorzügliche Anleitung und Förderung bedanke ich mich aufs herzlichste.

7 Anhang

71 Die optische Isotropie des kubischen Kristalls

Die Quadrate der Impulsmatrixelemente in Gl. (13) sind bei sonst gleichen Quantenzahlen unabhängig von dem Arm $\vec{k}^m$ des $\vec{k}$ -Sterns:

$$(a1) \quad |P(\vec{k}^m)_{\vec{a}}|^2 = |P(\vec{k}^1)_{\vec{a}}|^2$$

$\vec{a}$ soll der Einheitsvektor in Richtung des Polarisationsvektors des Lichtes sein. Seine Komponenten im m-ten Koordinatensystem sind a_h^m , $h = 1, 2, 3$. Die Gl. (13) läßt sich mit diesen Beziehungen umschreiben in

$$(a2) \quad \varepsilon_2 = C \frac{1}{q d_2} \sum_{m=1}^q \sum_{h=1}^3 (a_h^m)^2 |P_h^m|^2 = C \frac{1}{q d_2} \sum_{m=1}^q \sum_{h=1}^3 (a_h^m)^2 |P_h^1|^2$$

$|P_h^m|^2$ bezeichnet die Summe der Absolutquadrate von Impulsmatrixelementen, deren Richtung parallel zur Achse h des m-ten Koordinatensystems ist.

Die gleichen Elemente $\{\alpha^m | 0\}$, die aus $\vec{k}^1$ den Stern der Darstellung erzeugen, überführen auch die verschiedenen Koordinatensysteme ineinander. Die Koordinaten des Vektors $\vec{a}$ im m-ten Koordinatensystem sind durch

(a3)

$$a_i^{\alpha} = \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha}(\alpha^{\alpha})_{i1} a_i^{\alpha}$$

gegeben. $\Gamma_{\alpha}(\alpha^{\alpha})$ ist die Matrix der Vektordarstellung für das Gruppenelement $\{\alpha^{\alpha}\}$ der Gruppe G_{α} . Die Gl. (a2) geht damit in

$$\varepsilon_1 = C \frac{1}{q^2} \sum_{\alpha \in G_{\alpha}} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \Gamma_{\alpha}(\alpha^{\alpha})_{i1} a_i^{\alpha} \Gamma_{\alpha}(\alpha^{\alpha})_{j1} a_j^{\alpha} |P_{\alpha}^{\alpha}|^2$$

über. Man kann nun die Summe über alle Elemente α^{α} , die das Stern erzeugen, durch die Summe über alle Elemente α der Gruppe G_{α} ersetzen und den so entstehenden Ausdruck durch q/q dividieren, wobei q die Ordnung von G_{α} ist. ε_1 wird dadurch nicht geändert. Die Elemente β aus G_{α} , die gleichzeitig zur Gruppe $G_{\alpha}(\bar{k}^{\alpha})$ gehören, bewirken nämlich die Transformation

(a5)

$$a_i^{\alpha} = \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha}(\beta)_{i1} a_i^{\alpha}$$

Die Funktionen χ_1^{α} und χ_2^{α} sind dann Basisfunktionen zur gleichzeitigen Irreduziblen Darstellung der Gruppe $G_{\alpha}(\bar{k}^{\alpha})$, woraus die Beziehung

(a6)

$$|P_{\alpha}|^2 = |P_{\alpha}|^2$$

folgt. Diese Bedingung zeigt aber gerade, daß es erlaubt ist, in Gl. (a4) zur Summe über alle Elemente α aus G_{α} überzugehen:

(a7)

$$\varepsilon_1 = C \frac{1}{q^2} \sum_{\alpha} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \Gamma_{\alpha}(\alpha)_{i1} a_i^{\alpha} \Gamma_{\alpha}(\alpha)_{j1} a_j^{\alpha} |P_{\alpha}^{\alpha}|^2$$

Für den kubischen Kristall ist die Vektordarstellung $\Gamma_v(\alpha)$ eine irreduzible Darstellung. Aus diesem Grund läßt sich in (a7) das Schursche Lemma

$$(a8) \quad \sum_{\alpha} \Gamma_v(\alpha)_{ll} \Gamma_v(\alpha)_{ld} = \frac{2}{3} \delta_{ld}$$

anwenden, woraus die Beziehung

$$(a9) \quad \varepsilon_2 = C \frac{1}{3d_2} \sum_{l=1}^3 \sum_{d=1}^3 (q_l^1)^2 |P_d|^2 = C \frac{1}{3d_2} \sum_{d=1}^3 |P_d|^2$$

folgt. Sie hängt nicht mehr von den Komponenten des Polarisationsvektors ab, zeigt also die optische Isotropie des kubischen Kristalls.

72 Der Einfluß der Winkeländerungen auf das Reflexionsvermögen des Germaniums bei 2 eV

Die Änderung $\delta \varepsilon_1$ von ε_1 infolge der Änderung der Winkel zwischen dem Polarisationsvektor und den Impulsmatrixelementen soll für den Λ -Übergang des Germaniums bei $[001]$ -Spannungsachse untersucht werden. Den Ausgangspunkt bilden die Gln. (17) und (18). Wenn ϑ_1 der Winkel zwischen der $\vec{z}$ -Achse und der Spannungsachse ist, ϑ_2 der Winkel zwischen der $\vec{z}$ -Achse und der $[100]$ -Richtung (siehe Fig. 13), so lauten diese

$$(a10) \quad \varepsilon_{21} = \frac{C}{2} \left(\pi^2 \cos^2 \vartheta_1 + 5^2 \sin^2 \vartheta_1 \right)$$

$$(a11) \quad \varepsilon_{21} = \frac{C}{2} \left(\pi^2 \cos^2 \vartheta_1 + 5^2 \frac{1}{2} \cos^2 \vartheta_1 + 5^2 \sin^2 \vartheta_1 \right)$$

Daraus folgt wegen (16) für die Änderungen

$$(a12) \quad \delta \varepsilon_{211}^{\mathcal{P}} = \frac{\varepsilon}{2} (-\pi^2 + \sigma^2) \frac{2}{3} \sqrt{2} \delta \mathcal{P}_1$$

$$(a13) \quad \delta \varepsilon_{21}^{\mathcal{P}} = \frac{\varepsilon}{2} (-2\pi^2 \delta \mathcal{P}_1 - \sigma^2 \delta \mathcal{P}_1) \frac{1}{3} \sqrt{2}$$

Hier wurde $\delta \beta = 0$ benutzt; diese Beziehung ist aus Symmetriegründen erfüllt.

Zur Berechnung von $\delta \mathcal{P}_1$ und $\delta \mathcal{P}_2$ betrachtet man den vorliegenden Verformungszustand. Von den Komponenten des Spannungstensors ist nur σ_z von Null verschieden, wenn x, y, z die Kristallachsen $[100]$, $[010]$, $[001]$ bezeichnen. Die Spannungs-Dehnungs-Beziehung liefert dann für die von Null verschiedenen Komponenten des Dehnungstensors $\varepsilon_x, \varepsilon_y = \varepsilon_z = \frac{\sigma_z}{E_1} \varepsilon_2$. E_1 und E_2 sind zwei der elastischen Konstanten des Germaniums. Hieraus folgt für die Winkeländerungen

$$(a14) \quad \delta \mathcal{P}_1 = -\frac{\sqrt{2}}{3} \left(1 - \frac{E_2}{E_1}\right) \varepsilon_2$$

$$(a15) \quad \delta \mathcal{P}_2 = +\frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}}{3} \left(1 - \frac{E_2}{E_1}\right) \varepsilon_2 = -\frac{1}{2} \delta \mathcal{P}_1$$

Die Änderungen von ε_2 sind also durch

$$(a16) \quad \delta \varepsilon_{211}^{\mathcal{P}} = \frac{\varepsilon}{2} (\pi^2 - \sigma^2) \frac{4}{9} \left(1 - \frac{E_2}{E_1}\right) \varepsilon_2$$

$$(a17) \quad \delta \varepsilon_{21}^{\mathcal{P}} = -\frac{\varepsilon}{2} (\pi^2 - \sigma^2) \frac{2}{9} \left(1 - \frac{E_2}{E_1}\right) \varepsilon_2$$

gegeben. Die größte Änderung ist demnach für den Fall zu erwarten, bei dem der Polarisationsvektor parallel zur Spannungsachse ist und $\pi = 0$ gilt, d.h. beim Übergang $\alpha \rightleftharpoons \Lambda_4 + \Lambda_5 \rightarrow \Lambda_6$. Wegen (17)

ist diese maximale Änderung

$$(a18) \quad \delta \varepsilon_{21}^{\text{ph}} = - \frac{\varepsilon}{2} 6^2 \frac{4}{9} \left(1 - \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\right) \varepsilon_2 = - \varepsilon_2 \frac{2}{3} \left(1 - \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}\right) \varepsilon_2$$

Im Bereich der Maxima gilt etwa $\varepsilon_2 = 18^{1)}$, für das Verhältnis der elastischen Konstanten ist $\varepsilon_1/\varepsilon_2 = -0,27$ zu setzen $29)$, die gemessene Komponente der Verformung ist $|\varepsilon_2| = 0,4\%$. Setzt man diese Werte in (a18) ein, so folgt

$$(a19) \quad \left| \delta \varepsilon_{21}^{\text{ph}} \right| \approx 6 \times 10^{-2}$$

Das Reflexionsvermögen im Bereich der Maxima ist $R \approx 53\%$ (Fig. 3 und 4), aus $\varepsilon_2 \approx 18$ folgt dann $\varepsilon_1 \approx 33$. Mit diesen Werten der optischen Konstanten lautet die Gl. (21)

$$(a20) \quad \delta R^{\text{ph}} \approx 3 \times 10^{-3} \delta \varepsilon_1 + 3 \times 10^{-3} \delta \varepsilon_2$$

Die durch $\delta \varepsilon_2$ allein verursachte Änderung $\delta R_{\varepsilon_2}^{\text{ph}}$ ist wegen (a19)

$$(a21) \quad \delta R_{\varepsilon_2}^{\text{ph}} \approx 9 \times 10^{-5} \approx 10^{-4}$$

Die Größenordnung von $\delta \varepsilon_1$ läßt sich abschätzen. Dazu wird $\delta \varepsilon_2(\hbar\omega)$ als Gaußkurve mit der Halbwertsbreite $H = 0,1$ eV und dem Maximum $\delta \varepsilon_2(2,14\text{ eV}) = 6 \times 10^{-2}$ vorgegeben und mit Hilfe der Kramers-Kronig-Beziehung $\delta \varepsilon_1(\hbar\omega)$ ermittelt. Das Ergebnis ist

$$(a22) \quad \delta \varepsilon_1(H_{\text{max}}) - \delta \varepsilon_1(H_{\text{min}}) \approx \delta \varepsilon_2(H_{\text{max}})$$

Die Änderungen $\delta \varepsilon_1$ und $\delta \varepsilon_2$ sind also von gleicher Größenordnung. Die maximale Gesamtänderung des Reflexionsvermögens infolge der Winkeländerung ist somit im betrachteten Fall

$$(a23) \quad \delta R^{\text{max}} \approx 2 \times 10^{-4}$$

Vergleicht man damit die maximale gemessene Änderung des Reflexionsvermögens, $\delta R \approx 7 \times 10^{-3}$, so zeigt sich, daß der Einfluß der Winkeländerung in guter Näherung vernachlässigt werden kann.

§ Literaturverzeichnis

- 1) G. Harbecke, Z. Naturforschg. 19a, 548 (1964)
- 2) H. R. Philipp, E. A. Taft, Phys. Rev. 113, 1002 (1959)
- 3) H. R. Philipp, E. A. Taft, Phys. Rev. 120, 37 (1960)
- 4) D. Brust, J. C. Phillips, F. Bassani, Phys. Rev. Letters 9, 94 (1962)
- 5) D. Brust, M. L. Cohen, J. C. Phillips, Phys. Rev. Letters 9, 389 (1962)
- 6) L. van Hove, Phys. Rev. 89, 1189 (1953)
- 7) J. C. Phillips, Phys. Rev. 104, 1263 (1956)
- 8) L. Liu, Phys. Rev. 126, 1317 (1962)
- 9) R. Zallen, W. Paul, J. Tauc, Bull. Am. Phys. Soc. 7, 185 (1962)
- 10) J. Tauc, A. Abraham, J. Phys. Chem. Solids 20, 190 (1961)
- 11) F. Bassani, D. Brust, Phys. Rev. 131, 1524 (1963)
- 12) D. Brust, Phys. Rev. 134, A 1337 (1964)
- 13) H. R. Philipp, W. C. Dash, H. Ehrenreich, Phys. Rev. 127, 762 (1962)
- 14) H. Flietner, Phys. stat. solid. 2, 237 (1962)
- 15) G. B. Dubrovskii, V. K. Subashiev, Fizika Tverdogo Tela 5, 1104 (1963)
Englische Übersetzung in: Soviet Physics in Solid State 5, 805 (1963)
- 16) F. Lukeš, E. Schmidt, Physics of Semiconductors, Proc. of the 7th
International Conference, Dunod, Paris (1964), p. 197
- 17) J. Tauc, E. Antoncik, Phys. Rev. Letters 5, 253 (1960)
- 18) U. Gerhardt, Physics Letters 9, 118 (1964)
- 19) M. H. Cohen, Phil. Mag. 3, 762 (1958).
- 20) W. Heitler, The Quantum Theory of Radiation, 2nd ed., Oxford
University Press (1944), p. 108
- 21) F. Seitz, Ann. Math. 37, 17 (1936)
- 22) G. F. Koster, in: Solid State Physics 5, hrsg. von F. Seitz und
D. Turnbull, Academic Press, New York (1957), p. 173 ff.
- 23) R. J. Elliott, Phys. Rev. 95, 280 (1954)
- 24) J. C. Hensel, G. Feher, Phys. Rev. 129, 1041 (1963)
- 25) H. Hasegawa, Phys. Rev. 129, 1029 (1963)
- 26) J. Bardeen, W. Shockley, Phys. Rev. 80, 72 (1950)
- 27) C. Herring, E. Vogt, Phys. Rev. 101, 944 (1956)
- 28) H. Brooks, in: Advances in Electronics and Electron Physics 7,
hrsg. von L. Marton, Academic Press, New York (1956), p. 85 ff.

- 29) American Institute of Physics Handbook, McGraw-Hill, New York
(1957), p. 2-56
- 30) J. Goroff, L. Kleinman, Phys. Rev. 132, 1080 (1963)
- 31) L. Kleinman, Phys. Rev. 128, 2614 (1962)

Lebenslauf

Am 6. März 1935 wurde ich als Sohn des Dipl. Ing. August Gerhardt und seiner Ehefrau Ilse, geb. Kratzenberg, in Kassel geboren. Dort besuchte ich die Volksschule und die Wilhelmschule, ein Realgymnasium für Jungen, wo ich im Frühjahr 1955 mein Abitur ablegte. Von 1955 bis 1958 studierte ich Physik an der Technischen Hochschule in Darmstadt. Nach dem Vorexamen setzte ich mein Studium 1958 an der Technischen Universität Berlin fort, wo ich unter Herrn Professor Dr. H. Gobrecht meine Diplomarbeit über die elektrischen und optischen Eigenschaften von Quecksilberselenid-Einkristallen anfertigte und mich im Januar 1962 der Diplomhauptprüfung unterzog. Seit April 1962 arbeite ich im Physikalischen Institut der Universität Frankfurt am Main unter der Leitung von Herrn Professor Dr. W. Martienssen.

